ВРАХУВАННЯ СПІН-СПІНОВОЇ ВЗАЄМОДІЇ В ОДНОЧАСТИНКОВОМУ РІВНЯННІ ДІРАКА

І.І. Гайсак, В.С. Морохович

Ужгородський державний університет, 294000, Ужгород, вул.Волошина, 32

По аналогії з рівнянням Раріті-Швінгера для двоферміонної системи отримано рівняння для руху діраковської частинки в полі магнітного диполя. На основі теорії збурень проведено розрахунки надтонкого щеплення для основних станів орто- і парапозитронія.

Рівняння Дірака в полі магнітного диполя

Релятивістські ефекти, обумовлені наявністю спіна у взаємодіючих частинок відіграють важливу роль у фізиці атома, ядра і кварків. Як правило, ці ефекти розглядаються на основі рівняння Шредінгера [1] з так званим гамільтоніаном Брейта-Фермі [2]. Природньо ці ж поправки розглянути на основі рівняння Дірака. Відомо, що на відміну від рівняння Шредінгера, рівняння Дірака точно описує спін-орбітальну взаємодію.

Рівняння Дірака для вільної частинки має вигляд

$$\left(E-\hat{H}\right)\Psi=0, \qquad (1)$$

де гамільтоніан системи визначається виразом

$$\hat{H}=\hat{\vec{p}}\hat{\vec{\alpha}}+m\beta, \qquad (2)$$

де

$$\hat{\vec{\alpha}}=\begin{pmatrix}0 & \vec{\sigma}\\ \vec{\sigma} & 0\end{pmatrix},\quad \beta=\begin{pmatrix}\mathrm{I} & 0\\ 0 & -\mathrm{I}\end{pmatrix},$$

$\vec{\sigma}$ - матриці Паулі, I - одинична матриця. Тоді оператор гамільтона для вільної частинки можна записати у виді

$$\hat{H}=\begin{pmatrix}m & \vec{p}\vec{\sigma}\\ \vec{p}\vec{\sigma} & -m\end{pmatrix} \qquad (3)$$

При рухові електрона в зовнішньому полі (електромагнітному), яке задано скалярним і векторним потенціалами $\left(\Phi,\vec{A}\right)$, користуємось тими ж рівняннями, тільки замінивши в рівнянні Дірака оператори імпульса та енергії на вирази:

$$\vec{p}\to\vec{p}-e\vec{A},\qquad \beta m\to\beta m+e\Phi. \qquad (4)$$

Відповідно отримаємо гамільтоніан:

$$\hat{H}=\hat{\vec{\alpha}}\left(\vec{p}-e\vec{A}\right)+\beta m+e\Phi \qquad (5)$$

або в матричному виді

$$\hat{H}=\begin{pmatrix}U+m & \vec{p}\vec{\sigma}\\ \vec{p}\vec{\sigma} & U-m\end{pmatrix}-e\begin{pmatrix}0 & \vec{A}\vec{\sigma}\\ \vec{A}\vec{\sigma} & 0\end{pmatrix}, \qquad (6)$$

де $U=e\Phi$ - потенціальна енергія.

Хвильову функцію стаціонарних станів будемо шукати у виді

$$\Psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}f(r)\Omega_{jlm}\\ (-1)^{\frac{1+l-l'}{2}}g(r)\Omega_{jl'm}\end{pmatrix}, \qquad (7)$$

де $l=j\pm1/2,\ l'=2j-l$ [3].

Рівняння Дірака дає слідуючу систему рівнянь для φ і χ:

$$\begin{cases}(\varepsilon-U-m)\varphi=\vec{p}\vec{\sigma}\chi-e\vec{A}\vec{\sigma}\chi,\\ (\varepsilon-U+m)\chi=\vec{p}\vec{\sigma}\varphi-e\vec{A}\vec{\sigma}\varphi\end{cases} \qquad (8)$$

Для оцінки величини надтонкого щеплення енергетичних рівнів S-станів електрона в атомі можна вважати, що ядро атома являється точковим магнітним диполем з моментом $\vec{\mu}$. Такий диполь створює векторний потенціал:

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\vec{\mu} \times \vec{r}}{r^3}, \qquad (9)$$

де $\vec{\mu} = \frac{e\hbar}{2Mc}\vec{\sigma}$ - дипольний момент [4].

Тоді оператор імпульсу набуде вигляду:

$$\vec{p} \to \vec{p} - e\vec{A} = \vec{p} - \frac{e^2\hbar}{2Mcr^3}\vec{\sigma} \times \vec{r} \qquad (10)$$

В результаті отримаємо слідуючу систему для радіальних функцій:

$$\begin{cases} g' + \frac{1-\nu}{r}g + \frac{a}{6Mr^2}\left[\hat{S}_{12} - 2\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2\right]g + (\varepsilon - U - m)f = 0, \\ f' + \frac{1+\nu}{r}f + \frac{a}{6Mr^2}\left[\hat{S}_{12} - 2\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2\right]f - (\varepsilon - U + m)g = 0 \end{cases} \qquad (11)$$

де $\hat{S}_{12} = \left[\frac{3(\vec{\sigma}_1\vec{r})(\vec{\sigma}_2\vec{r})}{r^2} - \vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2\right]$ - тензорний оператор; $\vec{\sigma}_1$ - оператор спіна електрона, $\vec{\sigma}_2$ - оператор спіна джерела поля, $a = \frac{e^2\hbar}{c}$, $\nu = \begin{cases} -(l+1), j = l + 1/2, \\ +l, j = l - 1/2. \end{cases}$

Спінова структура хвильової функції

Стан двоферміонної системи визначається парністю $P = (-1)^{l+1}$ та повним моментом імпульсу $\vec{J}$:

$$\vec{J} = \vec{j} + \vec{s}_2,$$

де $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}_1$, $\vec{s}_1$ - спін електрона, $\vec{l}$ - орбітальний момент відносного руху частинок, $\vec{s}_2$ - спін другої частинки (силового центру). Хоч орбітальний момент $\vec{l}$ не зберігається, але оскільки парність зберігається, зручно користуватися спектроскопічними позначеннями і описувати можливі стани суперпозиціями S, P, ... компонент, як наведено нижче

Табл.1. Стани двоферміонної системи

	Синглетний стан (S=0)		Триплетний стан (S=1)	
J \ P	+	-	+	-
0	----	$^1S_0$	$^3P_0$	---
1	$^1P_1$	---	$^3P_1$	$^3S_1 + ^3D_1$
2	---	$^1D_2$	$^3P_2 + ^3F_2$	$^3D_2$

$$\vec{J} = \vec{l} + \vec{S}, \text{ де } \vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2.$$

Якщо система є істинно нейтральною (складається з частинки і її античастинки), тоді її стан характеризується комбінованою парністю $(-1)^{S+1}$. Але оскільки повний спін системи приймає лише два значення 0 і 1, то це рівнозначно збереженню повного спіна. З табл.1 видно, що і в загальному випадку стани $^1S_0$, $^3P_0$, $^3S_1 + ^3D_1$, $^3P_2 + ^3F_2$, ... є чистими спіновими станами.

Спінова структура зазначених компонент має вигляд:

$$^1S_0: \; \Phi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}|\beta\rangle - \Psi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}|\alpha\rangle\right),$$

$$^3S_1: \; \Phi = \Psi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}|\alpha\rangle,$$

$$^3D_1: \; \Phi = \frac{1}{2}\left(\sqrt{3}\Psi_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}|\beta\rangle - \Psi_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}|\alpha\rangle\right),$$

де $|\alpha\rangle$ і $|\beta\rangle$ - спінові хвильові функції джерела $\left(|\alpha\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, |\beta\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\right)$.

Одержана система рівнянь має вигляд

$$\begin{cases} F_0' + \left[\frac{\nu}{r} - \frac{a}{3Mr^2}\right]F_0 - (\varepsilon + m - U)G_0 + \frac{\sqrt{8}\alpha}{6Mr^2}F_2 = 0, \\ G_0' + \left[-\frac{\nu}{r} - \frac{a}{3Mr^2}\right]G_0 + (\varepsilon - m - U)F_0 + \frac{\sqrt{8}\alpha}{6Mr^2}G_2 = 0, \\ F_2' + \left[\frac{\nu}{r} - \frac{a}{3Mr^2}\right]F_2 - (\varepsilon + m - U)G_2 + \frac{\alpha}{6Mr^2}\left(\sqrt{8}F_0 - 2F_2\right) = 0, \\ G_2' + \left[-\frac{\nu}{r} - \frac{a}{3Mr^2}\right]G_2 + (\varepsilon - m - U)F_2 + \frac{\alpha}{6Mr^2}\left(\sqrt{8}G_0 - 2G_2\right) = 0, \end{cases} \tag{12}$$

де F_0 і G_0 - відповідно “велика“ и “мала“ компоненти хвильової функції S-складової $(l=0)$, F_2 і G_2 - компоненти хвильової функції D-складової $(l=2)$. Оскільки, в рівняннях (11) і (12) входить член $\sim 1/r^2$, то вклад спін-спінової взаємодії можна отримати тільки в рамках теорії збурення. Для тесту одержаного рівняння нами обчислено величину щеплення між основним станом орто- і парапозитронія.

Табл.2. Надтонке щеплення позитронія

Стани	На основі р-няШ-ра $\times 10^{-4}$ eV	На основі р-ня Д-ка $\times 10^{-4}$ eV	Експер. Е $\times 10^{-4}$ eV [4]
$^1S_0$	-3,623	-3,6713	
$^3S_1$	4,823	4,823	
$^3S_1 - ^1S_0$	8,44	8,4943	8,4225 ± 0,0017

1. RaritaW., Schwinger J.,Phys.Rev.**59**, 436, (1941).
2. Люха В.,Шёберл Ф., Сильное взаимодействие. Теория потенциальных моделей, Академический экспресс, Львов, (1996) 150с.
3. В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П.Питаевский, Квантовая електродинамика, Наука, Москва, (1989) с.112-164.
4. Г.Бете, Э.Солпитер, Квантовая механика с одним и двумя електронами, Наука, Москва, (1960), с.184-195.

SPIN-SPIN INTERACTION IN ONE PARTICLE DIRAC EQUATION

I.I. Haysak, V.S. Morokhovich

Department of Theoretical Physics, Uzhgorod State University,Voloshyna Str. 32, UA-294000

The system of equation for electron in the field of magnetic dipole based on the relativistic Dirac equation is derived. This system is similar for the system of Rarita-Schwinger based on the Schredinger equation. Numerical calculation for hyper fine splitting for positronium is carried out in the frame of perturbation theory.