§ 63. Уравнение Паули. Вектор плотности потока вероятности

В главе, посвященной релятивистской квантовой механике, будет установлено точное релятивистское уравнение квантовой механики и показано, что уравнение Шредингера получается из него при предельном переходе $v/c \to 0$.

При этом оказывается, что если учитывать члены различного порядка малости, то в гамильтониане будут возникать дополнительные слагаемые, описывающие ряд важных свойств квантовых систем.

В частности, как самый факт существования спина, так и существования у электрона магнитного момента, вытекает из релятивистского волнового уравнения при разложении по степеням v/c и сохранения членов первого порядка малости.

Откладывая доказательство этого утверждения до § 118, введем оператор собственного магнитного момента, в соответствии с (59,4), соотношением

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \alpha\hat{\boldsymbol{s}} = \frac{e}{mc}\hat{\boldsymbol{s}}. \tag{63,1}$$

Тогда оператор Гамильтона для электрона в электромагнитном поле приобретает вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + U(r) - \hat{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{\mathcal{H}} = \\ = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + U(r) - \frac{e}{mc}(\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{\mathcal{H}}), \tag{63,2}$$

где $\boldsymbol{\mathcal{H}}$ — напряженность магнитного поля. Поскольку гамильтониан зависит от спина, волновая функция электрона также зависит от спиновой переменной, т. е. $\psi = \psi(x, y, z, t, s_z)$. Уравнение для волновой функции $\psi(x, y, z, t, s_z)$ в магнитном поле, впервые введенное Паули и носящее его имя, имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi - \frac{e}{mc}(\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{\mathcal{H}})\psi + U\psi. \tag{63,3}$$

Найдем вектор плотности потока вероятности. Для этого выпишем уравнение для функции ψ^+

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^+}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi^+ - \frac{e}{mc}[(\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{\mathcal{H}})\psi]^+ + U\psi^+. \tag{63,3$'$}$$

Умножим (63,3) на ψ^+ слева, а (63,3′) на ψ справа и вычтем одно из другого.

Учитывая, что $\hat{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla\boldsymbol{A}$, после простых преобразований получаем

$$\frac{\partial(\psi^+\psi)}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m}\nabla[(\nabla\psi^+)\psi - \psi^+\nabla\psi] + \\ + \frac{e}{mc}\nabla(\boldsymbol{A}\psi^+\psi) + \frac{ie}{mc\hbar}[\psi^+(\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{\mathcal{H}})\psi - ((\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{\mathcal{H}})\psi)^+\psi]. \tag{63,4}$$

Из правил действия с матрицами (45,20) следует, что

$$((\hat{s}\mathcal{H})\psi)^{+} = \psi^{+}(\hat{s}^{+}\mathcal{H}) \tag{63,5}$$

и, кроме того, $\hat{s}^{+} = \hat{s}$ в силу эрмитовости оператора спина. Таким образом, слагаемое в квадратных скобках обращается в нуль и мы получаем выражение для вектора плотности потока вероятности. (Следует иметь в виду, что в него входят двухкомпонентные волновые функции.) Умножая его на заряд e, получаем вектор плотности электрического тока

$$\boldsymbol{j} = \frac{i\hbar e}{2m}((\nabla\psi^{+})\psi - \psi^{+}\nabla\psi) - \frac{e^2}{mc}\boldsymbol{A}\psi^{+}\psi. \tag{63,6}$$

Выражение (63,4) определяет вектор плотности потока вероятности $\boldsymbol{j}$ с точностью до $\operatorname{rot}\boldsymbol{B}$, где $\boldsymbol{B}$ — произвольный вектор. Можно показать, что $\boldsymbol{B} = \frac{e}{m}\psi^{+}\hat{s}\psi$, так что полное выражение для плотности электрического тока будет иметь вид [1])

$$\boldsymbol{j}_n = -\frac{i\hbar e}{2m}(\psi^{+}\nabla\psi - (\nabla\psi^{+})\psi) - \frac{e^2}{mc}\boldsymbol{A}(\psi^{+}\psi) + \frac{e}{m}\operatorname{rot}(\psi^{+}\hat{s}\psi). \tag{63,7}$$

Рассмотрим случай, когда частица движется в постоянном магнитном поле $\mathcal{H}$, а электрическое поле отсутствует. Векторный потенциал $\boldsymbol{A}$ при этом можно выбрать в виде

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}(\mathcal{H}\times\boldsymbol{r}). \tag{63,8}$$

Преобразуем уравнение Паули (63,3), учитывая, что для вектора-потенциала (63,8) справедливо соотношение

$$\hat{p}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}\hat{p}.$$

Кроме того, предполагаем, что магнитное поле $\mathcal{H}$ достаточно слабо и в соответствии с этим опускаем в уравнении Паули члены, квадратичные по $\mathcal{H}$. Тогда имеем:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi - \frac{e}{2mc}(\mathcal{H}\times\boldsymbol{r})\hat{p}\psi - \frac{e}{mc}(\hat{s}\mathcal{H})\psi.$$

Так как

$$(\mathcal{H}\times\boldsymbol{r})\hat{p} = \mathcal{H}(\boldsymbol{r}\times\hat{p}) = \mathcal{H}\hat{\boldsymbol{l}},$$

где $\hat{\boldsymbol{l}}$ — орбитальный момент количества движения, то

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi - (\hat{\mu}_l\mathcal{H})\psi - (\hat{\mu}_s\mathcal{H})\psi. \tag{63,9}$$

[1]) См. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 506.

Оператор $\hat{\mu}_l$,

$$\hat{\mu}_l = \frac{e}{2mc}\hat{l},$$

естественно назвать оператором орбитального магнитного момента (в отличие от $\hat{\mu}_s$ — оператора спинового магнитного момента).

Мы видим, что отношение орбитального магнитного момента $\hat{\mu}_l$ к механическому моменту $\hat{l}$, как и в классической физике, равняется $\frac{e}{2mc}$. Для спиновых моментов это отношение вдвое больше.

Уравнения (63,3) и (63,9) естественным образом обобщаются на случай системы частиц. Так, для системы частиц (с зарядом e, массой m), помещенных в слабое магнитное поле $\mathcal{H}$, уравнение Паули (63,9) имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\sum_k \hat{p}_k^2\psi - \frac{e}{2mc}(\hat{\boldsymbol{L}}\mathcal{H})\psi - \frac{e}{mc}(\hat{\boldsymbol{S}}\mathcal{H}) + U_{вз}\psi, \quad (63,10)$$

где $\hat{\boldsymbol{L}} = \sum_k \hat{l}_k$ — оператор полного орбитального, а $\hat{\boldsymbol{S}} = \sum_k \hat{s}_k$ — полного спинового моментов системы (суммирование ведется по всем частицам системы), $U_{вз}$ — потенциальная энергия взаимодействия частиц между собой.

Не представляет труда учесть и член квадратичный по магнитному полю. Уравнение Паули в этом случае имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left\{\frac{1}{2m}\sum_k \hat{p}_k^2 - \frac{e}{2mc}(\hat{\boldsymbol{L}} + 2\hat{\boldsymbol{S}})\mathcal{H} + \frac{e^2}{8mc^2}\sum_k [\mathcal{H}\boldsymbol{r}_k]^2 + U_{вз}\right\}\psi. \quad (63,11)$$

Мы увидим, что в некоторых случаях (см. § 75) квадратичный член играет существенную роль.

Если магнитное поле отсутствует и потенциальная энергия взаимодействия $U_{вз}$ не зависит от спинов частиц, например при кулоновском взаимодействии заряженных частиц, то гамильтониан системы не содержит спиновых переменных. В этом случае волновая функция может быть представлена в виде произведения соответственно координатной и спиновой волновых функций. Частицы могут находиться в произвольном спиновом состоянии, координатная же функция удовлетворяет обычному уравнению Шредингера.