

LATVIJAS UNIVERSITĀTES
FIZIKAS UN MATEMĀTIKAS FAKULTĀTE
FIZIKAS NODAĻA

**UZ KLEINA PARADOKSU BALSTĪTA
NELINEĀRĀ ELEKTRONA MODEĻA IZPĒTE**

MAGISTRA DARBS

Autore: **Danuta Rudakovska**

Studenta apliecības Nr.: dr12022

Darba vadītājs: Dr. Habil. Phys. Imants Bērons

RĪGA 2017

Anotācija

Darbā elektrona nelineārās teorijas attīstīšanas ietvaros tika pētīts Diraka-Maksvela vienādojumu sistēmas speciālgadījums - Diraka-Puasona vienādojumu sistēma. Izmantojot Matlab programmatūru, tika veikti skaitliskie aprēķini dažādiem vienādojumu sistēmas moduļiem ar mērķi iegūt informāciju par lādiņa sadalījumu elektronā. Balstoties uz Kleina paradoksa parādību, kuras koncepcija pieļauj, ka brīvam elektronam ar pietiekoši lielu atgrūšanas potenciālu ir iespējams atrasties pozitīvās enerģijas saistītajos stāvokļos, darbā tika veikti aprēķini diviem galvenajiem gadījumiem: definējot sākuma nosacījumus nulles un bezgalības apgabalā. Atsevišķi tika veikti aprēķini arī ievērojot elektrona magnētisko momentu.

Rezultāti tika izanalizēti, tajā skaitā arī salīdzinot ar pieejamiem zinātniskajiem rakstiem par šo tēmu.

Atslēgas vārdi: Diraka-Maksvela vienādojumu sistēma, Diraka-Puasona vienādojumu sistēma, Kleina paradokss, elektrona lādiņa sadalījums, elektrona magnētiskais moments, spins, skalārais potenciāls, vektorpotenciāls, brīvais elektrons.

Abstract

As one of the nonlinear electron theory development steps, the special case of the Dirac-Maxwell system of equations - Dirac-Poisson system was studied. In order to obtain an information about the distribution of the electron charge, some numerical calculations for the different modules of system of equations were carried out using Matlab software. The Klein paradox phenomenon suggests that free electron with a great enough repulsive potential can occupy some bound states of positive energy. This assumption was used to define two major cases for which the calculations were carried out: the system with initial conditions defined when $x \rightarrow 0$ and the system with initial conditions defined when $x \rightarrow \infty$. Some additional calculations were carried out taking into account the electron magnetic moment.

The results were analyzed, including comparison with the available scientific articles on the subject.

Key words: Dirac-Maxwell system of equations, Dirac-Poisson system of equations, Klein paradox, distribution of the electron charge, the electron magnetic moment, spin, scalar potential, vector potential, free electron.

Darba uzdevumi

1. Apgūt Diraka teoriju un izprast Kleina paradoksu.
2. Izstudēt literatūru par nelineāro Diraka-Maksvela vienādojumu sistēmu.
3. Veikt skaitliskos aprēķinus dažādiem Diraka-Maksvela vienādojumu sistēmas modeļiem.
4. Izanalizēt iegūtos rezultātus un izdarīt secinājumus.

Saturs

1 Ievads.....	5
2 Diraka teorija.....	7
2.1 Diraka vienādojums.....	7
2.2 Pauli teorija elektrona spinam.....	9
2.3 Pauli teorija centrālām potenciālam.....	11
2.4 Diraka vienādojuma precīzs atrisinājums.....	14
3 Kleina paradokss.....	18
4 Diraka-Maksvela vienādojumi.....	24
4.1 Diraka-Puasona vienādojumu sistēma.....	24
4.1.1 Modelis elektronam pašā radītajā Kulona laukā.....	28
4.1.2 Diraka-Puasona vienādojumu sistēma ar robežnosacījumiem $x \rightarrow \infty$	31
4.1.3 Diraka-Puasona vienādojumu sistēma pie robežnosacījumiem $x \rightarrow 0$	34
4.2 Vektorpotenciāls.....	41
5 Secinājumi un kopsavilkums.....	46
6 Izmantotā literatūra.....	48

1 Ievads

Ņūtona vienādojums apraksta ķermeņa ar masu m kustību ārējā spēka iedarbībā. Masa ir vienīgais parametrs, kurš raksturo ķermeni, nav svarīga tā forma vai sastāvs. Līdzīga situācija ir arī mikropasaulē, kur daļiņas kustību aprakstu Šrēdingera vai Diraka vienādojumi. Mikropasaulē daļiņas kustība saistīta ar de Brojī viļni, kurš pazūd, ja daļiņa apstājas. Kustības vienādojumi neko nepasaka par objekta uzbūvi.

Visprecīzākā teorija, kas pastāv mūsdienās un spēj pareizi paredzēt tādu virtuālo procesu kā elektronu-pozitronu pāru rašanās un absorbcija ietekmi uz atomu enerģētisko līmeņu nobīdi, kā arī uz elektrona magnētisko momentu, ir, bez šaubām standartmodelis un tā ietvaros kvantu elektrodinamikas teorija (QED). Elektronu-pozitronu pāru veidošanās rezultējas vakuuma polarizācijā [1]. QED koncepcija ir balstīta uz lauku kvantēšanas procedūru, [2], proti, tiek uzdots sistēmas lagranžiāns, tālāk tiek noteikti impulsi, kas ir kanoniski saistīti ar koordinātām, un tiek meklēta Hamiltona funkcija. Galvenais lauku kvantēšanas procedūras uzdevums ir nodrošināt daļiņu skaita izmaiņas iespēju teorijas ietvaros, piemēram, jau minēto augstāk elektronu-pozitronu pāru rašanās gadījumā. Lādēto daļiņu mijiedarbību ar elektromagnētisko lauku QED matemātiski var aprakstīt ar perturbāciju teorijas palīdzību. Savukārt, tās rēķini, kas, piemēram, ir saistīti ar Kulona mijiedarbību un, attiecīgi, hamiltoniāna daļu, kas ir atkarīga no garenviļņiem, noved pie diverģējošās rindas parādīšanās [2]. Kā viegli var saprast, šis moments var ievērojami traucēt, un, lai atrīvētos no diverģējošiem hamiltoniāna locekļiem, ir jāveic t.s. elektrona masas un lādiņa „renormēšanas” procedūra. Tas, bez šaubām, būtiski sarežģī QED teorijas izmantošanu.

Mikropasaulē daļiņas struktūra tiek skaidrota balstoties uz vēl sīkāku daļiņu savstarpējo mijiedarbību: molekula sastāv no atomiem, atomi – no atoma kodola un elektroniem, atoma kodols – no protoniem un neitroniem utt. Piemēram, standartmodelis paredz elementārdaļiņu hierarhiju, proti, to, ka, piemēram, tādas daļiņas kā neitroni un protoni, kuras tiek klasificētas kā hadroni, sastāv no vēl mazākām daļiņām – kvarkiem un gluoniem. Savukārt, kvarki un leptoni tiek aproksimēti kā punktveida daļiņas. Nākamais solis šajā hierarhijā, par ko ir bijušas dažādas diskusijas [3], ir kvarku un leptonu „sašķelšanās” iespēja vēl fundamentālākās daļiņās. Šķiet, ka šāda veida pieņēmumi varētu turpināties vēl un vēl. Šis ceļš neko nav devis elektrona struktūras noskaidrošanai: piemēram, modelis [4], kurā tiek pieņemts, ka elektrons sastāv no divām vēl sīkākām daļiņām, nav bijis sekmīgs.

Kā alternatīvu šādai pieejai ir vērts apskatīt nelineāro teoriju. Dabā ir zināmi kompakti, stabili veidojumi, kuru struktūra tiek skaidrota ar nelineāru vienādojumu atrisinājumiem. Makropasaulē tādi objekti ir virpuļi un solitoni, mikropasaulē – Higsas bozons un citi mikroobjekti [5]. Tika piedāvātas arī tādas teorijas, kurās elektrons, kurš darbojas pats uz sevi, tiek uzskatīts par solitonu [6]. Tas var atrasties dažādos kvantu stāvokļos un tikt raksturots ar iekšējo enerģiju, dimensijām un ģeometrisku formu. Atoms savukārt sastāvētu no viena vai vairākiem elektronu solitoniem, kuri, savukārt, mijiedarbojas ar kodola solitonu.

Ir piedāvāta arī nelineāra teorija fotona aprakstam [7, 8], kurā tiek modificēts Maksvela vienādojums, pieņemot ka vakuumam ir polarizācijas konstante fotona izplatīšanās virzienā. Bet šajā darbā tiek aplūkots elektrons, nevis fotons, tāpēc tālāk būtu korekti pievērsties detalizētāk tieši tam nelineārās teorijas ietvaros.

Elektrona lādiņa sadalījumam bieži tiek lietots punktveida modelis. Skaidrs, ka tas ir tuvinājums, jo dabā nav punktveida objektu. Nesen [9] tika piedāvāts ļoti vienkāršs elementārlādiņa nelineārs modelis, balstoties uz Maksvela vienādojumu. Modelis paredz, ka ir lādiņi ar pretējām zīmēm, ka pilnais lādiņš nav atkarīgs no lādiņa rādiusa (elektrona un protona lādiņa absolūtā vērtība ir vienāda) un modelī ir mehānisms, kas vienādi lādētu objektu satur kopā. Vakuuma nelineārā „atbilde” uz lādiņa parādīšanos nodrošina lādiņa kā viena vesela objekta pastāvēšanu, tā neļauj lādiņam sabrukt. Šī koncepcija atšķiras no klasiskajām, kuras paredz to, ka lādiņam atrodoties vakuumā, tā polarizācijas ietekmē lādiņa lielums mainās. Tādējādi varētu apskatīt hipotēzi, ka elementārdaļiņu struktūra var būt vakuuma īpašību definēta, un tās var tikt uzskatītas par vakuuma nelineārajiem veidojumiem. Bet skaidrs, ka šo modeli nevar izmantot tieši elektrona aprakstam, jo elektronam bez lādiņa ir vēl masa, spins un magnētiskais moments, un visi šie lielumi ir savstarpēji saistīti.

Bet literatūrā [10, 11, 12] ir piedāvāti nelineāru vienādojumu modelis elektrona aprakstam. Tā ir nelineāra Diraka-Maksvela vienādojumu sistēma, kurā elektrons kustās paša radītajā elektromagnētiskajā laukā. Maģistra darbā tiks apskatīti daži šīs sistēmas modeļi ar nolūku iegūt (ja tas ir iespējams) kaut kādu informāciju par lādiņa sadalījumu elektronā.

Darba otrajā nodaļā tiek izklāstīta Diraka teorija. Trešā nodaļa sniedz ieskatu Kleina paradoksa parādības būtībā. Iegūtie rezultāti tiek reprezentēti un analizēti tajā skaitā arī salīdzinājumā ar zinātniskajiem rakstiem par šo tēmu darba ceturtajā nodaļā. Piektajā nodaļā ir sniegti vispārīgi secinājumi un kopsavilkums.

2 DIRAKA TEORIJA

2.1 Diraka vienādojums

Kā zināms, tādu daļiņu kā elektrons pilnvērtīgam kvantu mehāniskajam aprakstam nevar kalpot klasiskais Šrēdingera vienādojums, jo tas neko nepasaka par elektrona spinu un tāpēc nevar paredzēt tādas parādības kā, piemēram, sīkstruktūras veidošanās, kas ir saistīta ar spin-orbitalās mijiedarbības procesiem [13]. Šādiem mērķiem nevar tikt piemērots arī Kleina-Gordona vienādojums, jo tas ir derīgs tikai nulles spina daļiņu gadījumā. Tādējādi, lai aprakstītu elektronu, ievērojot tā spina vērtību 1/2, kā arī visus relativistiskos efektus, ir jāizmanto Diraka vienādojums.

Ja pieņem par obligātiem nosacījumiem to, ka šajā viļņu vienādojumā nevar būt atvasinājumu pēc laika, kas ir augstāki par pirmo kārtu (lai neparādītos negatīvas varbūtības blīvumu vērtības), kā arī to, ka vienādojuma viļņa funkcijai ir jāapmierina 1. kārtas diferenciālo vienādojumu pēc visām četrām koordinātēm, kas figurē relativitātes teorijā (x, y, z, ct), tad var pieņemt, ka viļņa funkcija ψ sastāv no N komponentēm u_l , un vispārīgs vienādojums izskatītos šādi [2]:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial u_l}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 \sum_{n=1}^N a_{ln}^k \frac{\partial u_n}{\partial x^k} + \frac{imc}{\hbar} \sum_{n=1}^N \beta_{ln} u_n = 0 \quad (1)$$

Brīvai daļiņai visi telpas punkti un visi laika momenti ir ekvivalenti (laika-telpas viendabīgums), no tā seko, ka vienādojuma (1) a_{ln}^k un β_{ln} lielumiem ir jābūt bezdimensionāliem un konstantiem, kā arī no \vec{r} un \vec{p} neatkarīgiem un komutējošiem ar tiem. Ja pieņem, ka $N=4$, tad viļņa funkciju u var prezentēt spinora formā:

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} \quad (2)$$

Savukārt, α un β lielumus, ko sauc par Diraka operatoriem, var reprezentēt kvadrātveida četrriindu matricu formā [14]:

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^P \\ \sigma^P & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (3)$$

kur katra no komponentēm, proti, σ^P un I ir kvadrātveida divriindu Pauli matricas un vienības kvadrātveida divriindu matrica, attiecīgi:

$$\sigma_1^P = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2^P = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3^P = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

Ja tā, tad, ievērojot arī uzdotā elektromagnētiska lauka skalāro $\varphi(\mathbf{r})$ un vektorpotenciālu $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, vienādojumu (1) var transformēt sekojošā formā [13]:

$$Hu = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u = Eu \quad (5)$$

$$H = -e\varphi + \beta E_0 + \vec{\alpha}(c \hat{p} + e\vec{A})$$

kur H – ir Hamiltona operators, c – gaismas ātrums, E – stacionārā stāvokļa pilnā enerģija, \hat{p} – impulsa operators ($\hat{p} = -i\hbar\nabla$) un $E_0 = mc^2$ – elektrona miera enerģija. No sakarības (5) seko, ka pie nosacījuma, ka Hamiltona operatoram ir jābūt Ermita, arī Diraka operatoriem α un β jābūt tādiem, proti:

$$\alpha = \alpha^+, \quad \beta = \beta^+ \quad (6)$$

Vienādojums (5) arī ir Diraka lineārais vienādojums nekovariantajos apzīmējumos.

Ja vienādojumu (5) no kreisās puses pareizina ar u^* un vienādojuma (5) kompleksi saistīto vienādojumu

$$-i\hbar \frac{\partial u^*}{\partial t} + i\hbar c(\vec{\nabla}u^*)\vec{\alpha} + u^* \beta mc^2 = 0 \quad (7)$$

no labās puses ar u , un atņem vienu no otra, tad iegūstam nepārtrauktības vienādojumu:

$$\frac{\partial P}{\partial z} + \text{div} \vec{S} = 0, \quad (8)$$

kur

$$P = u^* u \quad (9)$$

ir varbūtības blīvums un

$$\vec{S} = cu^* \vec{\alpha} u \quad (10)$$

ir varbūtības plūsma. Pareizinot P un \vec{S} ar elektrona lādiņu $-e$, iegūsim attiecīgi elektrona lādiņu un strāvas blīvumu.

2.2 Pauli teorija elektrona spinam

Diraka teorija paredz to, ka elektronam ir savs magnētiskais moments [15, 16]. Tam klāt nāk vēl tāds fizikālais lielums kā kustības daudzuma moments jeb spins.

Diraka teoriju var vienkāršot. Sākumā doto vispārīgo lineāro Diraka vienādojumu (5) var pārrakstīt četru diferenciālo vienādojumu sistēmas formā, kur katrs vienādojums atbilst, attiecīgi, vienai no četrām spinora u (2) komponentēm:

$$\begin{aligned} \frac{1}{c}(E_0 - E - e\varphi)u_1 + \left[\hbar \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{e}{c}(A_x - iA_y) \right] u_4 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{e}{c} A_z \right) u_3 &= 0 \\ \frac{1}{c}(E_0 - E - e\varphi)u_2 + \left[\hbar \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{e}{c}(A_x + iA_y) \right] u_3 - \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{e}{c} A_z \right) u_4 &= 0 \\ \frac{1}{c}(E_0 + E + e\varphi)u_3 - \left[\hbar \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{e}{c}(A_x - iA_y) \right] u_2 - \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{e}{c} A_z \right) u_1 &= 0 \\ \frac{1}{c}(E_0 + E + e\varphi)u_4 - \left[\hbar \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{e}{c}(A_x + iA_y) \right] u_1 - \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{e}{c} A_z \right) u_2 &= 0 \end{aligned} \quad (11)$$

Izmantojot sistēmas (11) trešo un ceturto diferenciālo vienādojumu u_3 un u_4 komponentēm, attiecīgi, un pieņemot, ka $E = E_0$, kā arī neievērojot potenciālus $A(\mathbf{r})$ un $\varphi(\mathbf{r})$, var iegūt sekojošās tuvinātās izteiksmes:

$$\begin{aligned} u_3 &= -i \frac{\hbar}{2mc} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x} - i \frac{\partial u_2}{\partial y} + \frac{\partial u_1}{\partial z} \right) \\ u_4 &= -i \frac{\hbar}{2mc} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} + i \frac{\partial u_1}{\partial y} - \frac{\partial u_2}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (12)$$

Izmantojot sekojošās reprezentācijas:

$$u = \begin{pmatrix} U_A \\ U_B \end{pmatrix}, \quad U_A = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}, \quad U_B = \begin{pmatrix} u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} \quad (13)$$

kur U_A matricas komponentes tiek sauktas par lielajām, bet U_B komponentes, attiecīgi, par mazajām [17], kā arī sakarības (4), no vienādojumiem (12) var iegūt tuvināto vienādojumu mazajām U_B komponentēm, ar kura palīdzību tās tiek saistītas ar U_A lielajām komponentēm:

$$U_B = (2mc)^{-1} \left(\vec{\sigma}^P \hat{p} \right) U_A \quad (14)$$

Lietojot reprezentācijas (13) un sakarības (3) arī pašu Diraka vienādojumu (5) var uzrakstīt sekojošā formā:

$$\begin{aligned} (E - E_0 + e\varphi)U_A &= \vec{\sigma}^P (c \hat{p} + e\vec{A})U_B \\ (E + E_0 + e\varphi)U_B &= \vec{\sigma}^P (c \hat{p} + e\vec{A})U_A \end{aligned} \quad (15)$$

Savukārt, ja aprēķiniem tiek izmantots Diraka vienādojuma kvadrātiskais variants, kas tiek iegūts izmantojot kovariantos apzīmējumus, kā arī pielietojot noteiktas korekcijas, tad vienādojums, kurā ietilpst tikai matricas U_A lielās komponentes, un kurš ir pamats Pauli teorijai elektronam ar spinu, izskatās šādi:

$$\begin{aligned}
& [W + e\varphi + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{1}{2mc^2} (W + e\varphi)^2 + i \frac{e\hbar}{mc} \vec{A} \nabla - \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + \\
& + i \frac{\mu_0}{2mc} \vec{\varepsilon} \hat{p} - \frac{\mu_0}{2mc} \vec{\sigma}^P (\vec{\varepsilon} \times \hat{p}) - \mu_0 \vec{\sigma}^P \vec{H}] U_A = 0
\end{aligned} \tag{16}$$

kur $\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc}$ - ir elektrona spina magnētiskais moments, jeb Bora magnetons, W - ir nerelativistiskā enerģija, $\vec{\varepsilon}$ - ir elektriskā lauka intensitāte, \vec{H} - magnētiskā lauka intensitāte, kuras izsakās antisimetrisko tenzoru formā [17]:

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu}, \quad H_i = F_{kl}, \quad \varepsilon_i = iF_{i4} \tag{17}$$

2.3 Pauli teorija centrālām potenciālam

Ja apskatīsim vienādojumu (16) gadījumam, ka elektrons atrodas centrālā elektriskajā laukā, tad pieņemsim, ka magnētiska lauka intensitāte \vec{H} ir vienāda ar nulli, kā arī vektorpotenciāls $\vec{A}(r) = 0$. Skalārā potenciāla funkcija būs atkarīga tikai no radiālā attāluma r . Tādējādi:

$$\vec{\varepsilon} = -\frac{\vec{r}}{r} \frac{d\varphi}{dr} \tag{18}$$

Aizvietojojot vienādojumā (16) $\frac{1}{2} \vec{\sigma}^P$ ar spina operatoru \hat{s} , kā arī izmantojot faktu, ka

$\hbar \hat{k} = \hat{r} \times \hat{p}$, iegūstam sekojošo:

$$Wu = \left\{ -\left(e\varphi + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) - \frac{1}{2mc^2} (W + e\varphi)^2 + \frac{\mu_0 \hbar}{2mc} \frac{d\varphi}{dr} \left[\frac{\partial}{\partial r} - \frac{2}{r} \hat{k} \hat{s} \right] \right\} u \tag{19}$$

Var apskatīt vienādojuma (19) lielumu $H_0 = -(e\varphi + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta)$ kā neperturbēto Hamiltoniānu. Šī Hamiltoniāna īpašfunkcijas fiksētām n un l vērtībām vispārīgā forma izskatās šādi [13]:

$$u_{nl} = R_{nl}(r) \begin{pmatrix} aY_{lm_l}(\theta, \varphi) \\ bY_{lm_l'}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} \quad (20)$$

kur θ, φ – ir elektrona sfēriskās leņķiskās koordinātes, a un b – patvaļīgas konstantes, bet m_l un m_l' nav atkarīgi viens no otra (šie skaitļi ir izvēlēti no veselu skaitļu komplekta $-l, -l+1, \dots, +l$).

Fizikālā jēga ir tikai $\frac{a}{b}$ attiecībai. Pilnais Hamiltoniāns tāpat kā neperturbētais H_0 komutē ar pilnā kustības daudzuma momenta z -komponenti $M_z = k_z + s_z$. Varam atlasīt tikai tādas u_{nl} funkcijas (20), kuras ir arī operatora M_z īpaštāvokļi ar īpašvērtību m . Zinot, kā ir saistīti M_z , k_z un s_z savā starpā, k_z īpašvērtības (m_l, m_l') , kā arī to, ka $\sigma_3^P = 2s_z$, varam uzrakstīt:

$$M_z \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(m_l + \frac{1}{2}\right)u_1 \\ \left(m_l - \frac{1}{2}\right)u_2 \end{pmatrix} \quad (21)$$

Varam redzēt, ka šajā situācijā ir spēkā sekojošās sakarības: $m_l + \frac{1}{2} = m_l' - \frac{1}{2} = m$.

Tā kā vienādojumā (19) ieiet arī operatoru reizinājums $\hat{k} \hat{s}$, tad attiecībai $\frac{a}{b}$ ir jābūt tādai, lai funkcija u būtu īpaštāvoklis ne tikai neperturbētam Hamiltoniānam H_0 , operatoram M_z un operatoram \hat{k}^2 , bet arī tam pašam operatoru reizinājumam $\hat{k} \hat{s}$. Zinot, ka:

$$2\hat{k} \hat{s} = \hat{M}^2 - \hat{k}^2 - \hat{s}^2 \quad (22)$$

kā arī to, ka operatora $2\hat{k} \hat{s}$ īpašvērtība ir X , var izspriest, ka šī īpašvērtība ir arī operatora \hat{M}^2 ar īpašvērtību $j(j+1)$ īpaštāvoklis. Izmantojot Pauli spinorus (4), sakarības matricu elementiem:

$$\begin{aligned} (k_x + ik_y)Y_{lm}(\theta, \varphi) &= \sqrt{(l-m)(l+m+1)}Y_{l,m+1}(\theta, \varphi) \\ (k_x - ik_y)Y_{lm}(\theta, \varphi) &= -\sqrt{(l+m)(l-m+1)}Y_{l,m-1}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (23)$$

kā arī izvēloties viļņu funkciju u formā (20) un ievērojot savstarpējas sakarības starp m , m_l un m_l' , varam iegūt:

$$2\hat{k}\hat{s}u = Xu = \left(\begin{array}{c} \left[a \cdot \left(m - \frac{1}{2}\right) - b \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} \right] Y_{l, m - \frac{1}{2}} \\ \left[-a \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} - b \cdot \left(m + \frac{1}{2}\right) \right] Y_{l, m + \frac{1}{2}} \end{array} \right) R_{nl}(r) \quad (24)$$

Šie vienādojums ir spēkā divu iespējamo $\frac{a}{b}$ attiecību gadījumā:

$$\frac{a_+}{b_+} = -\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{l-m+\frac{1}{2}}}, \quad \frac{a_-}{b_-} = \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{l+m+\frac{1}{2}}} \quad (25)$$

No tā seko, ka operatora $2\hat{k}\hat{s}$ īpašvērtība X , kā arī operatora \hat{M}^2 īpašvērtība j , kas ir saistīta ar X šādi:

$$X = j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \quad (26)$$

ir vienādi ar:

$$\begin{array}{l} X_+ = l \\ X_- = -(l+1) \end{array}, \quad \begin{array}{l} j_+ = l + \frac{1}{2} \\ j_- = l - \frac{1}{2} \end{array} \quad (27)$$

Ja $l=0$, tad $X_+ = X_- = 0$ un $j_+ = j_- = \frac{1}{2}$. Tādā gadījumā divas normētas viļņu funkcijas izskatīsies sekojoši:

$$\begin{aligned}
u_{nl,j=l+\frac{1}{2},m} &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} R_{nl}(r) \begin{pmatrix} \sqrt{l+m+\frac{1}{2}} Y_{l,m-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \\ -\sqrt{l-m+\frac{1}{2}} Y_{l,m+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \end{pmatrix} \\
u_{nl,j=l-\frac{1}{2},m} &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} R_{nl}(r) \begin{pmatrix} \sqrt{l-m+\frac{1}{2}} Y_{l,m-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \\ \sqrt{l+m+\frac{1}{2}} Y_{l,m+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{28}$$

2.4 Diraka vienādojuma precīzs atrisinājums

Tagad tiks iegūts precīzs Diraka vienādojuma atrisinājumu diskrēts spektrs elektronam, kurš atrodas Kulona laukā. Pieņemsim, ka $\vec{A}=0$ un $\varphi = \frac{Ze}{r}$, kur Z – atomnumurs, e – elektrona lādiņš, r – attālums no elektrona līdz punktam, kur ir potenciāls φ . Tādā gadījumā diferenciālo vienādojumu sistēma (11) izskatās šādi [13]:

$$\begin{aligned}
-\frac{i}{\hbar c} \left(E + \frac{Ze^2}{r} - E_0 \right) u_1 + \frac{\partial u_3}{\partial z} + \frac{\partial u_4}{\partial x} - i \frac{\partial u_4}{\partial y} &= 0 \\
-\frac{i}{\hbar c} \left(E + \frac{Ze^2}{r} - E_0 \right) u_2 - \frac{\partial u_4}{\partial z} + \frac{\partial u_3}{\partial x} + i \frac{\partial u_3}{\partial y} &= 0 \\
-\frac{i}{\hbar c} \left(E + \frac{Ze^2}{r} + E_0 \right) u_3 + \frac{\partial u_1}{\partial z} + \frac{\partial u_2}{\partial x} - i \frac{\partial u_2}{\partial y} &= 0 \\
-\frac{i}{\hbar c} \left(E + \frac{Ze^2}{r} + E_0 \right) u_4 - \frac{\partial u_2}{\partial z} + \frac{\partial u_1}{\partial x} + i \frac{\partial u_1}{\partial y} &= 0
\end{aligned} \tag{29}$$

Šo vienādojumu „apstrādei” tiks izmantotas tuvinātas viļņu funkcijas komponentes u_1 un u_2 , kuras ir iegūstamas ar Pauli teorijas izteiksmēm (28). Piemēram, gadījumam $j = l + \frac{1}{2}$:

$$\begin{aligned}
u_1 &= g(r) \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l, m-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\
u_2 &= -g(r) \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l, m+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi)
\end{aligned} \tag{30}$$

Ir vērts atzīmēt, ka tagad atšķirībā no (28) radiālā īpašfunkcija $g(r)$ netiek pielīdzināta Šrēdingera funkcijai $R_{nl}(r)$, bet tiek atstāta kā patvaļīga. Ievietojot (30) sistēmas (29) divos pēdējos vienādojumos, kā arī izmantojot sakarības:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial z} [f(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)] &= \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+3)(2l+1)}} Y_{l+1, m} \left(\frac{df}{dr} - l \frac{f}{r} \right) + \\
&+ \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} Y_{l-1, m} \left(\frac{df}{dr} + (l+1) \frac{f}{r} \right), \\
\left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) (f Y_{lm}) &= \sqrt{\frac{(l+m+2)(l+m+1)}{(2l+3)(2l+1)}} Y_{l+1, m+1} \left(\frac{df}{dr} - l \frac{f}{r} \right) - \\
&- \sqrt{\frac{(l-m)(l-m-1)}{(2l+1)(2l-1)}} Y_{l-1, m+1} \left(\frac{df}{dr} + (l+1) \frac{f}{r} \right), \\
\left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) (f Y_{lm}) &= - \sqrt{\frac{(l-m+2)(l-m+1)}{(2l+3)(2l+1)}} Y_{l+1, m-1} \left(\frac{df}{dr} - l \frac{f}{r} \right) + \\
&+ \sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l+1)(2l-1)}} Y_{l-1, m-1} \left(\frac{df}{dr} + (l+1) \frac{f}{r} \right)
\end{aligned} \tag{31}$$

varam iegūt:

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar c} \left(E + \frac{Ze^2}{r} + E_0 \right) u_3 &= \frac{\partial u_1}{\partial z} + \frac{\partial u_2}{\partial x} - i \frac{\partial u_2}{\partial y} = \sqrt{\frac{l-m+\frac{3}{2}}{2l+3}} \left(\frac{dg}{dr} - l \frac{g}{r} \right) Y_{l+1, m-\frac{1}{2}} \\
\frac{i}{\hbar c} \left(E + \frac{Ze^2}{r} + E_0 \right) u_4 &= \sqrt{\frac{l+m+\frac{3}{2}}{2l+3}} \left(\frac{dg}{dr} - l \frac{g}{r} \right) Y_{l+1, m+\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{32}$$

Pieņemot, ka:

$$\begin{aligned}
u_3 &= -\sqrt{\frac{l-m+\frac{3}{2}}{2l+3}} if(r)Y_{l+1, m-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\
u_4 &= -\sqrt{\frac{l+m+\frac{3}{2}}{2l+3}} if(r)Y_{l+1, m+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi)
\end{aligned} \tag{33}$$

varam atrast, ka lai izpildītos (32), funkcijām g un f ir jāapmierina sekojošā sakarība:

$$\frac{1}{\hbar c} \left(E + \frac{Ze^2}{r} + E_0 \right) f = \frac{dg}{dr} - l \frac{g}{r} \tag{34}$$

Ievietojot tagad (33) sistēmas (29) trešajā un ceturtajā vienādojumā, kā arī atkal izmantojot formulas (31), varam iegūt divus identiskos vienādojumus, kuri ir spēkā tikai tad, ja starp funkcijām f un g ir sekojoša sakarība:

$$\frac{1}{\hbar c} \left(E + \frac{Ze^2}{r} - E_0 \right) g = -\frac{df}{dr} - (l+2) \frac{f}{r} \tag{35}$$

Izmantojot šo pašu paņēmieni, gadījumam $j = l - \frac{1}{2}$ var iegūt:

$$\begin{aligned}
u_1 &= \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} g(r)Y_{l, m-\frac{1}{2}} \\
u_2 &= \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} g(r)Y_{l, m+\frac{1}{2}} \\
u_3 &= -\sqrt{\frac{l+m-\frac{1}{2}}{2l-1}} if(r)Y_{l-1, m-\frac{1}{2}} \\
u_4 &= -\sqrt{\frac{l-m-\frac{1}{2}}{2l-1}} if(r)Y_{l-1, m+\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{36}$$

Kā arī nosacījumus:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar c}\left(E + \frac{Ze^2}{r} + E_0\right)f &= \frac{dg}{dr} + (l+1)\frac{g}{r} \\ \frac{1}{\hbar c}\left(E + \frac{Ze^2}{r} - E_0\right)g &= -\frac{df}{dr} + (l-1)\frac{f}{r}\end{aligned}\tag{37}$$

Var ieviest jauno kvantu skaitli:

$$\begin{aligned}\chi &= -(j + \frac{1}{2}) = -(l+1) & \text{gadījumiem: } & j = l + \frac{1}{2} \\ \chi &= (j + \frac{1}{2}) = l & & j = l - \frac{1}{2}\end{aligned}\tag{38}$$

Tagad vienādojumus (34), (35) un (37) var uzrakstīt sekojošā formā:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar c}\left(E + \frac{Ze^2}{r} + E_0\right)f - \left[\frac{dg}{dr} + (1 + \chi)\frac{g}{r}\right] &= 0 \\ \frac{1}{\hbar c}\left(E + \frac{Ze^2}{r} - E_0\right)g + \left[\frac{df}{dr} + (1 - \chi)\frac{f}{r}\right] &= 0\end{aligned}\tag{39}$$

Jaunajam kvantu skaitlim χ var būt jebkura vērtība, izņemot nulli.

Lai atrisinātu šos radiālos diferenciālos vienādojumus, ir jāpielieto ļoti apjomīgs matemātiskais aparāts, un tā kā šī darba aprēķinos tiek izmantota Diraka-Puasona vienādojumu sistēma, bet Diraka vienādojuma atrisinājums kā tāds nekur netiks izmantots, tad atrisinājumi netiks sniegti.

3 KLEINA PARADOKSS

Ja apskatām tādu ierasto kvantu mehānikas situāciju, kā elektrona tunelēšanās caur potenciālu barjeru, tad, izmantojot Diraka relativistisko teoriju, šajā gadījumā var iegūt rezultātus, kas diezgan krasi atšķiras no tiem, kuri tiek iegūti ar Šrēdingera vienādojuma palīdzību.

Ja potenciālā barjera tiek uzskatīta par bezgalīgu, un tā sākas punktā $x=0$, tad viļņa funkcijas atkarību no laika var uzrakstīt, izmantojot reizinātāju $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, kur pilnā enerģija E ir pozitīva un lielāka par E_0 . Skaidrs, ka apgabalā $x<0$ Diraka vienādojuma atrisinājums atšķirsies no atrisinājuma apgabalā $x>0$, proti, pēc tunelēšanas cauri barjerai (sk. att. 3.1). Tādējādi, atrisinājumu pirmajā apgabalā var sadalīt divās daļās: krītošā un atstarotā, un pierakstīt, attiecīgi sekojoši:

$$u_I = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx} \quad (40)$$

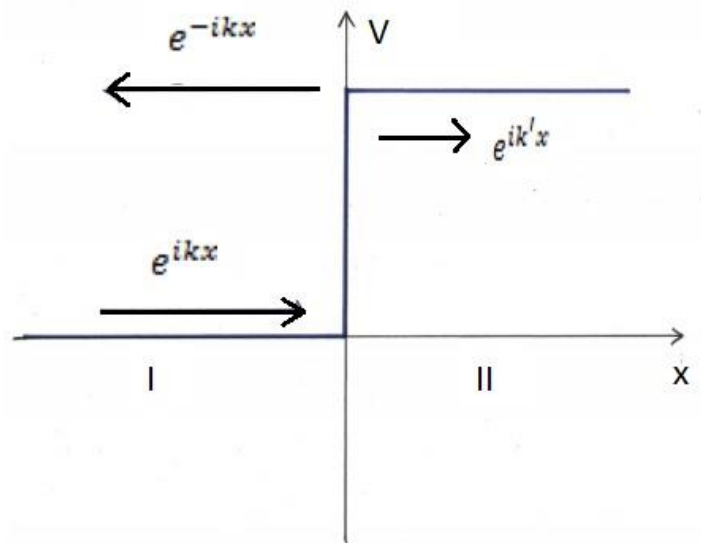
$$\text{kur } k^2 = \frac{E^2 - E_0^2}{\hbar^2 c^2} \text{ un reizinātāji } A = \left(ik\gamma_1 - \frac{\gamma_4 E + E_0}{\hbar c} \right) \Gamma, \quad A' = B \left(-ik\gamma_1 - \frac{\gamma_4 E + E_0}{\hbar c} \right) \Gamma.$$

B – ir konstants lielums, savukārt, γ_1 un γ_4 – ir lielumi no kvaternionu grupas, kurai izpildās Diraka vienādojumi abos apgabalos. Tā kā kvaternionu teorija ir diezgan apjomīga un tai nav sevišķi daudz nozīmes tieši šī darba kontekstā, tad detalizēti tā netiks apskatīta [18]. Lai A' un A izteiksmēs (vēlāk arī A'') kvaternionu γ_4 , varētu aizvietot ar 1, reizinātājs Γ tiek pieņemts par $\frac{1}{2}(1 + \gamma_4)$.

Otrā apgabala ($x>0$) atrisinājumā figurēs tikai viena daļa – tā, kura „atbild” par viļņa iziešanu cauri:

$$u_{II} = A'' e^{ik'x} \quad (41)$$

kur pēc analogijas ar pirmā apgabala atrisinājumu: $k'^2 = \frac{(E-V)^2 - E_0^2}{\hbar^2 c^2}$, V – ir potenciāla lielums, un, attiecīgi, $A'' = C \left(ik'\gamma_1 - \frac{\gamma_4(E-V) + E_0}{\hbar c} \right) \Gamma$, C – konstants lielums, tāpat kā B .



Att.3.1: Potenciālās barjeras problēmas atrisinājumi elektronam divos apgabalos

Tā kā pirmā apgabala vienādojuma atrisinājumam punktā $x=0$ ir jāpāriet otrā apgabala atrisinājumā, tad robežnosacījumi izskatās sekojoši:

$$u_I(x=0) = u_{II}(x=0) \quad (42)$$

No tā, savukārt, seko, ka: $A + A' = A''$. Izmantojot pēdējo sakarību, kā arī pielietojot vairākas matemātiskās operācijas, varam iegūt konstanšu B un C izteiksmes [18]:

$$B = \frac{\frac{k}{k'} - \frac{E + E_0}{E - V + E_0}}{\frac{k}{k'} + \frac{E + E_0}{E - V + E_0}} = \frac{a - b}{a + b}, \quad \begin{aligned} a^2 &= \frac{E - E_0}{E + E_0} \\ b^2 &= \frac{E - V - E_0}{E - V + E_0} \end{aligned} \quad (43)$$

$$C = \frac{k}{k'} \frac{2b}{a + b} = \frac{E + E_0}{E - V + E_0} \frac{2a}{a + b} \quad (44)$$

Tad var apskatīt sekojošus atsevišķus gadījumus:

- 1) $V = 0$, $b = a$, $B = 0$
- 2) $V = E - E_0$, $b = 0$, $B = 1$

$$3) V = E + E_0, \quad b = \infty, \quad B = -1$$

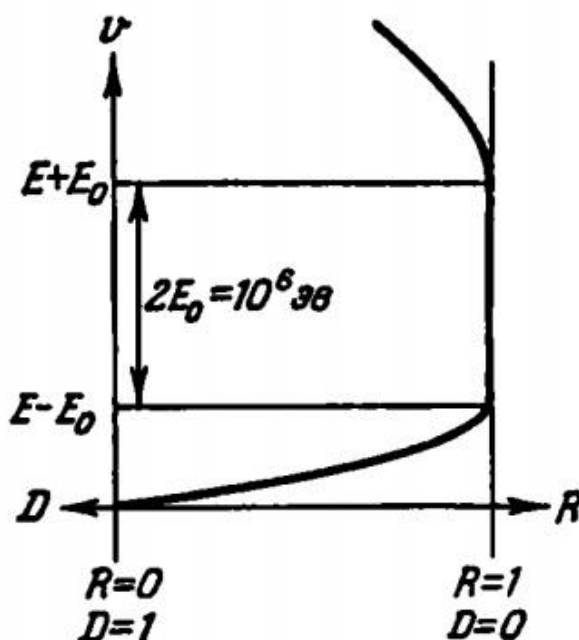
$$4) V = \infty, \quad b = 1, \quad B = \frac{a-1}{a+1}$$

Tā kā lielums $R = |B|^2$ ir atstarošanas koeficients, tad pie dažādām potenciāla V vērtībām, atbilstoši, ir iespējami sekojoši gadījumi:

$$R = \begin{cases} \left(\frac{a-b}{a+b}\right)^2 & \text{pie } V < E - E_0 \text{ un } V > E + E_0 \\ 1 & \text{pie } E - E_0 < V < E + E_0 \end{cases} \quad (45)$$

Attēlā 3.2 varam redzēt, ka apgabalā starp 1) un 2) atstarošanas koeficients R uzvedas tieši tādā veidā, kādā arī bija sagaidāms, proti, kad potenciāls V ir vienāds ar nulli, atstarošanās vispār nenotiek, savukārt, pie $V = E - E_0$ koeficients R ir vienāds ar 1, un notiek pilnīgā atstarošanās. Starp $V=0$ un $V = E - E_0$ atstarošanas koeficients pieņem, attiecīgi, starpvērtības.

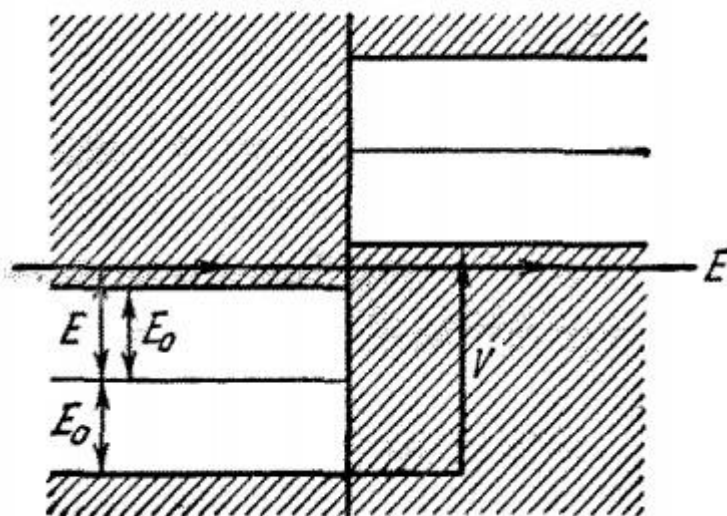
Starp 2) un 3), proti, tur, kur $E - E_0 < V < E + E_0$ atrodas pilnīgās atstarošanās apgabals, kur R visur ir vienāds ar 1.



Att.3.2: Atstarošanas koeficienta R un transmisijas koeficienta D atkarības no potenciālās barjeras augstuma V [5]

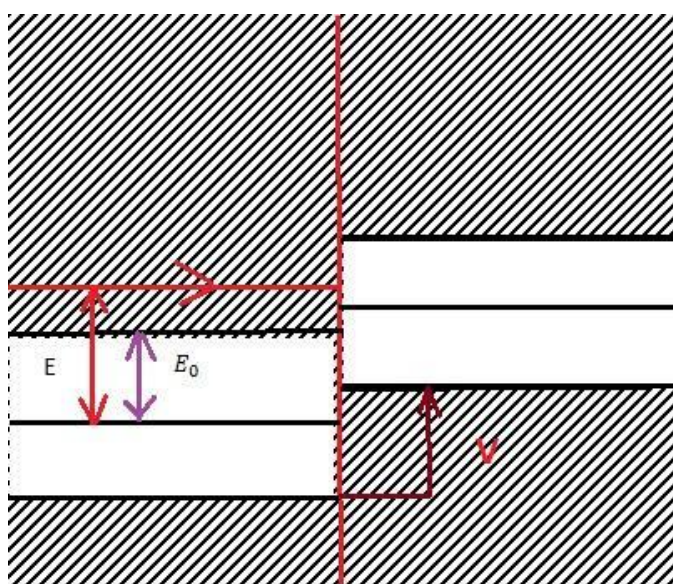
Savukārt, apgabalā starp 3) un 4) elektrons uzvedas paradoksāli: šeit atstarošanas koeficients R ir mazāks par 1, proti, atstarošanās nav pilnīga, neskatoties uz to, ka elektrona enerģijas E nepietiek tam, lai pārvarētu potenciālo barjeru: $V > E + E_0$. Citiem vārdiem, šajā gadījumā varbūtībai, ka elektrons tunelēsies cauri barjerai un nokļūs apgabalā II, ir galīga vērtība. Šī arī ir Kleina paradoksa būtība. Bet šī atziņa absolūti nav izskaidrojama nedz ar klasiskās mehānikas palīdzību, nedz ar nerelativistisko Šrēdingera teoriju. Savukārt, izmantojot Diraka teoriju un tās pieņēmumu par negatīvās enerģijas līmeņu eksistenci, kļūst skaidrs, ka Kleina paradokss var tikt interpretēts kā šo koncepciju sekas.

Ja apskatām attēlu 3.3, tad varam redzēt, ka kreisajā daļā ($x < 0$, $V = 0$) ir attēlota brīvā elektrona enerģētisko līmeņu shēma. Svītrots apgabals atbilst atļautai zonai, savukārt balts – aizliegtai. Ja apskatāmajā situācijā tiek iesaistīta potenciāla barjera ar augstumu $V > E + E_0$, tad līmeņi transformējas atbilstoši attēla labajai daļai, proti, līmeņi, kas agrāk reprezentēja negatīvās enerģijas zonu (apakšā), tagad tika pacelti līdz kreisās daļas svītrotai zonai, proti, līdz zonai ar pozitīvo enerģiju. Uz potenciālu barjeru krītošā elektrona enerģija E attēla kreisajā daļā ir attēlota kā līnija virs aizliegtās nesvītrotās zonas, tā kā potenciāls V ir pietiekoši liels, tad aizliegtās zonas līmeņi tiek pacelti nepieciešamajā augstumā – tā, lai elektrons, saglabājot konstantu enerģiju E varētu tunelēt cauri barjerai un atkal nokļūt svītrotajā, t.i. atļautajā zonā, tikai tagad attēlā labajā daļā ($x > 0$). Tādējādi elektrons tunelējas un nonāk apakšējā enerģētiskajā zonā pēc Kleina paradoksa, kas, savukārt, atbilst Diraka līmeņu teorijas priekšstatiem.



Att.3.3: Enerģētiskās zonas pārvietošanās pietiekoši liela potenciāla V gadījumā [5]

Pavisam citāda situācija veidojas tad, ja potenciālās barjeras augstums V nav pietiekoši liels, proti, $E - E_0 < V < E + E_0$. Attēlā 3.4 var redzēt, ka šajā gadījumā aizliegtu līmeņu zona nobīdās nepietiekoši augsti – un tādējādi, pie minētā augstāk nosacījuma, ka elektrona enerģijai E ir jāpaliek nemainīgai, E taisnei attēla labajā daļā būs jāturpinās jau aizliegtajā (baltajā) zonā, kas, attiecīgi, nevar notikt. Tieši tāpēc pie $E - E_0 < V < E + E_0$ elektrons nav spējīgs pārvarēt potenciālu barjeru un notiek pilnīgā atstarošanās ($R=1$).



Att.3.4: Energētiskās zonas pārvietošanās nepietiekoši liela potenciāla V gadījumā

Ir jāpiebilst, ka līdz šim, kā jau bija norādīts iepriekš, tika apskatīti gadījumi, kad potenciāls ir bezgalīgi stāvs. Ja bezgalīgi stāvs potenciāls tiek aizvietots ar lēzenu, tad saskaņā ar Zautera teoriju [19], transmisijas koeficients ir D ir eksponenciāli atkarīgs no attiecības $\frac{b}{\lambda_c}$, kur b – ir potenciālās barjeras platums un λ_c - Komptona viļņa garums. Jo lielāka ir šī attiecība, proti, jo izteiktāka ir nevienādība $b > \lambda_c$, jo mazāks ir transmisijas koeficients D , un, attiecīgi, mazāka Kleina paradoksa izpausme. Zautera teorija, kas, faktiski, ir maksimāli pietuvināta reāliem apstākļiem potenciālās barjeras veida ziņā, sākumā tika virzīta uz to, lai kaut kādā mērā „neutralizētu” Kleina paradoksu klasiskās (lineārās) Diraka teorijas ietvaros. Izejot no Zautera rezultātiem, klasiskā Diraka teorija ir spēkā tikai tad, ja tiek aplūkoti lauki, kuru intensitāte pēc

moduļa ir mazāka par kritisko $E_{krit} = \frac{m_0^2 c^3}{e\hbar}$. Savukārt, ir pamats uzskatīt, ka tādos apgabalos, kuri, piemēram, robežojas ar elektronu, pietiekoši lielās lauka intensitātes dēļ (lielākas par norādīto kritisko) Kleina paradoksa izpausme varētu būt diezgan ievērojama, kas, attiecīgi, varētu būt sagaidāms šī darba ietvaros.

Ir vērts atzīmēt arī to, ka saskaņā ar pēdējo gadu Kleina paradoksa problēmai veltītiem pētījumiem [20], gadījumā ja potenciāls ir $V > E + E_0$, atstarošanas koeficients R var sasniegt arī tādas vērtības, kas ir lielākas par 1. Tas varētu būt skaidrojams ar elektronu-pozitronu pāru rašanos.

4 DIRAKA-MAKSVELA VIENĀDOJUMI

Ja uz elektronu nedarbojas ārējais lauks, tad Diraka vienādojums (5) ir ļoti vienkāršs. Tas satur kā parametru elektrona masu, un tā atrisinājums ir plakanais vilnis, kuru ļoti plaši izmanto kvantu elektrodinamikā dažādu procesu varbūtības aprēķināšanai. Ja ir ārējie lauki, tad atrisinājums kļūst sarežģītāks.

Bet te paceļas viens principiāls jautājums. Elektronam ir lādiņš un magnētiskais moments, kuri rada elektromagnētisko lauku, kurš neatraujami saistīts ar elektronu. Šī paša elektrona radītā elektromagnētiskā lauka iedarbība uz elektrona kustību parasti netiek ņemti vērā. Bet ir mēģinājumi elektrona radītā lauka ietekmi uz tā kustību ņemt vērā. Lai to izdarītu, jāatceras (vien. (8) un (9)), ka elektrona viļņu funkcija u nosaka elektriskā lādiņa blīvumu $-eu^*u$ un strāvas blīvumu $-ecu^*\vec{a}u$. Savukārt, no Maksvela vienādojumiem [21] seko, ka lādiņi un strāvas attiecīgi ģenerē elektromagnētisko lauku ar skalāro potenciālu ϕ un vektoriālo potenciālu \vec{A} , kurus nosaka no vienādojumiem:

$$\Delta\phi = 4\pi eu^*u, \quad (46)$$

$$\Delta\vec{A} = 4\pi eu^*\vec{a}u. \quad (47)$$

Šie vienādojumi uzrakstīti statiskā tuvinājumā, kas nozīmē, ka lādiņa un strāvas blīvumi nav no laika atkarīgi. Rezultātā arī ϕ un \vec{A} nav no laika atkarīgi; pretējā gadījumā vienādojumi (46) un (47) kreisajā pusē būtu jāievēro otrie atvasinājumi pēc laika. Vienādojumu sistēmu (46), (47) un (5) vai (15) sauc par Diraka-Maksvela vienādojumu sistēmu statiskā tuvinājumā. Sistēma ir nelineāra un to ļoti intensīvi ir pētījuši matemātiķi [12, 22, 23, 24], pierādot daudzas un dažādas teorēmas. Skaitliski šī sistēma risināta tikai dažos darbos [10, 11]. Reizēm tiek apskatīta vienkāršota sistēma, atmetot vienādojumu (47) un vektorpotenciālu Diraka vienādojumā. Tādu sistēmu sauc par Diraka-Puasona sistēmu.

4.1 Diraka-Puasona vienādojumu sistēma

Izmantojot vienādojumu sistēmu (39) un pieņemot, ka $l=0$ (ja l nebūs vienāds ar nulli, tad pie $r \rightarrow 0$ viļņa funkcija arī tieksies uz nulli), un $m=1/2$ (magnētiskais kvantu skaitlis), varam dabūt, ka $\chi=-1$, un sistēma (39) paliek šāda:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar c} \left(E + \frac{Ze^2}{r} + E_0 \right) f &= \frac{dg}{dr} \\ \frac{1}{\hbar c} \left(E + \frac{Ze^2}{r} - E_0 \right) g + \frac{df}{dr} + \frac{2f}{r} &= 0\end{aligned}\tag{48}$$

Nelineārās teorijas ietvaros mēs uzskatīsim, ka uz brīvu elektronu iedarbojas tikai un vienīgi viņa paša radītais atgrūšanas (skalārais) potenciāls $\varphi = -eF(r)$. No tā izriet, ka sistēma izskatīsies sekojoši:

$$\begin{aligned}[\kappa + \kappa_0 - \alpha F(r)]f &= \frac{dg}{dr} \\ [\kappa - \kappa_0 - \alpha F(r)]g + \frac{df}{dr} + \frac{2f}{r} &= 0\end{aligned}\tag{49}$$

kur $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ - ir sīkstrukturācijas konstante, $\kappa = \frac{E}{\hbar c}$ un $\kappa_0 = \frac{E_0}{\hbar c}$.

Atgriežoties pie atgrūšanas potenciāla funkcijas $F(r)$, varam apgalvot, ka tai ir jāapmierina Puasona vienādojums [21, 24]:

$$\Delta F = -4\pi u^* u\tag{50}$$

Tā kā funkcijai F ir tikai radiālā atkarība, tad sfēriskajās koordinātēs laplasiāns no tās izskatīsies šādi [13]:

$$\Delta F = \frac{d^2 F}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dF}{dr}\tag{51}$$

Atceroties viļņa funkcijas u spinora reprezentāciju (13), kā arī formulas (30) un (33) spinora komponentēm un sfērisko harmoniku Y_{lm} tabulētās vērtības [13], varam iegūt:

$$U_A = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g(r) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$U_B = \begin{pmatrix} u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -if(r) \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \cos \theta \\ -if(r) \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \sin \theta \cdot e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad (52)$$

$$\frac{d^2 F}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dF}{dr} = -(g^2 + f^2). \quad (53)$$

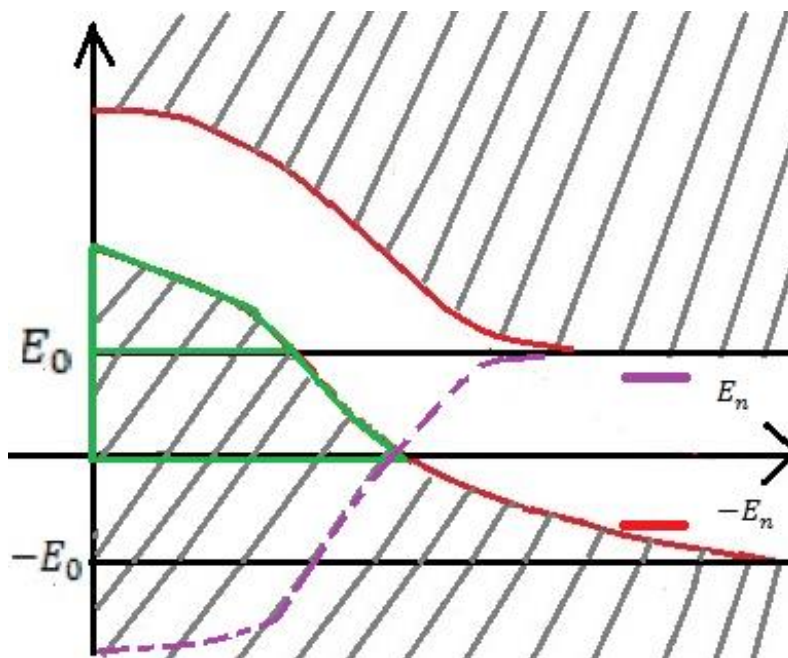
Vienādojumu sistēmas (49) un (53) risināšanā var izmantot tradicionālo pieeju, proti, meklēt tādu īpašvērtību E_n un tai atbilstošas funkcijas g , f un F , kuras ir galīgas pie $r = 0$, bet pie $r \rightarrow \infty$ g un f eksponenciāli dilst un F tiecas uz Kulona potenciālu $\frac{1}{r}$. Tādas īpašvērtības tika atrastas, piemēram, darbā [11] un tās atrodas tuvu enerģijas negatīvajam spektram: $E_n = mc^2 + \Delta E_u$, kur E_u ir mazs un pozitīvs lielums. Šos negatīvās enerģijas stāvokļus ir grūti sasaistīt ar elektronu, jo šāds elektrons anihilējot ar pozitronu, nevis izdalītu enerģiju $-mc^2$, bet patērētu enerģiju E_u . Var iegūt arī pozitīvās īpašvērtības hipotētiskajā modelī [11], kurā sīkstruktūras konstante ir lielāka par 1. Bet var izmantot arī citu pieeju, definējot, ka mierā esošam elektronam, uz kuru nedarbojas ārējie lauki, tā pilnā enerģija E ir vienāda ar mc^2 . Tas ir ļoti strikts nosacījums, kurš var arī neizpildīties pie augstāk minētajiem robežnosacījumiem, bet turpmāk tiks izmantota tikai šī pieeja un tāpēc sistēma izskatās tieši šādi:

$$\begin{cases} (2\kappa_0 - \alpha F)f = \frac{dg}{dr} \\ -\alpha Fg + \frac{df}{dr} + \frac{2f}{r} = 0 \\ \frac{d^2 F}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dF}{dr} = -(g^2 + f^2) \end{cases} \quad (54)$$

Atgriežoties pie Kleina paradoksa tēmas, kā jau bija teikts iepriekš, Zautera teorijas tuvinājumā, kas pieņem potenciālu barjeru par lēzenu, nevis bezgalīgi stāvu, elektrona varbūtībai tunelēties tai cauri ir eksponenciāls raksturs. Tātad šajā gadījumā zonu attēlojums atšķirsies no tā, kurš bija piedāvāts attēlā 3.3. Nobīde potenciāla ietekmē nebūs lēcienveidīga, bet gan

pakāpeniska, un tādējādi brīvā elektrona atļauto un aizliegtās zonas attēlojums būs tāds, kādu to var redzēt attēlā 4.1.1.

Tāpat kā iepriekš atļautās zonas ir svītrotas, bet aizliegtā zona ir balta. Šajā gadījumā aizliegtai zonai ir potenciālās barjeras loma, caur kuru elektrons pie noteiktiem apstākļiem, par kuriem jau tika stāstīts iepriekš, var tunelēties [25]. Varam redzēt divas sarkanās līknes $-E_0$ un E_0 , kuras reprezentē brīvā elektrona negatīvo un pozitīvo enerģētisko spektru, attiecīgi. Kleina paradoksa gadījumā elektrons, kas atrodas atļautajā zonā, kas ir saistīta ar E_0 līkni, var tunelēties cauri barjerai un nokļūt atļautās zonas spektra daļā, kas ir saistīta ar $-E_0$ līkni (apvilktā ar zaļo krāsu attēlā 4.1.1), jo potenciāla ietekmē notiek negatīvo enerģiju spektra nobīde uz augšu.



Att.4.1.1: Aizliegtās un atļauto zonu reprezentācija.

4.1.1 Modelis elektronam paša radītajā Kulona laukā

Pirmajā darba posmā sistēmas atrisinājumi tika apskatīti Diraka divu vienādojumu sistēma ar Kulona potenciālu. Ja atgriezāties pie sistēmas (54) pirmā un otrā vienādojuma, tad, izmantojot bezdimensionalizācijas sakarības:

$$\begin{aligned} r &= \frac{x}{2\kappa_0} & F &= 2\kappa_0 U \\ g &= (2\kappa_0)^{\frac{3}{2}} G & f &= (2\kappa_0)^{\frac{3}{2}} H \end{aligned} \quad (55)$$

kā arī pieņemot, ka potenciāla funkcijai F pie lieliem x ir Kuloniska uzvedība: $F = \frac{1}{r}$, varam pārrakstīt tos sekojošā veidā:

$$\begin{aligned} \left[1 - \frac{\alpha}{x}\right] H &= \frac{dG}{dx} \\ \frac{\alpha}{x} G &= \frac{dH}{dx} + \frac{2H}{x} \end{aligned} \quad (56)$$

Izslēdzot G :

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{\alpha}{x}\right) H \alpha &= \frac{d}{dx}(\alpha G) = \frac{d}{dx} \left[x \frac{dH}{dx} + 2H \right] = x \frac{d^2 H}{dx^2} + 3 \frac{dH}{dx} \Rightarrow \\ \left[x \frac{d^2}{dx^2} + 3 \frac{d}{dx} - \alpha + \frac{\alpha^2}{x} \right] H &= 0 \end{aligned} \quad (57)$$

Vienādojuma (57) atrisinājums ir atrodams formā [26]:

$$H = \frac{1}{x} Z_{2\sqrt{1-\alpha^2}}(2\sqrt{-\alpha x}) \quad (58)$$

kur $Z_{2\sqrt{1-\alpha^2}}(2\sqrt{-\alpha x})$ ir modificēta Beseļa funkcija ar indeksu $\nu = 2\sqrt{1-\alpha^2}$ un imagināru argumentu $i2\sqrt{\alpha x}$ [27]. Tādas var būt divas: $I_{2\sqrt{1-\alpha^2}}(2\sqrt{\alpha x})$ un $K_{2\sqrt{1-\alpha^2}}(2\sqrt{\alpha x})$ (Makdonalda funkcija). Pie maziem argumentiem tās var pieņemt par proporcionālām sekojošiem lielumiem:

$$I_{2\sqrt{1-\alpha^2}}(2\sqrt{\alpha x}) \sim (2\sqrt{\alpha x})^{2\sqrt{1-\alpha^2}} \quad (59)$$

$$K_{2\sqrt{1-\alpha^2}}(2\sqrt{\alpha x}) \sim (2\sqrt{\alpha x})^{-2\sqrt{1-\alpha^2}} \quad (60)$$

Atmetot α^2 zem kvadrātsaknes, iegūsim, ka funkcija H tieksies uz konstanti pie $x \rightarrow 0$ funkcijas I izmantošanas gadījumā, un diverģē kā x^{-2} Makdonalda funkcijas gadījumā. Savukārt, pie lieliem attālumiem funkcija I eksponenciāli aug, bet Makdonalda funkcija eksponenciāli dilst, tādēļ tālākos rēķinos ir jāizmanto Makdonalda funkcija K . Tā rezultātā iegūstam:

$$H = \frac{1}{x} K_{2\sqrt{1-\alpha^2}}(2\sqrt{\alpha x}) \quad (61)$$

Šīs funkcijas uzvedība pie lieliem attālumiem x :

$$H(x \rightarrow \infty) = \frac{c \exp(-2\sqrt{\alpha x})}{x^{5/4}} \quad (62)$$

Un tad, attiecīgi:

$$G(x \rightarrow \infty) = \frac{1}{\alpha} \left[x \frac{dH}{dx} + 2H \right] \approx -\frac{c}{\sqrt{\alpha}} \frac{\exp(-2\sqrt{\alpha x})}{x^{3/4}} \quad (63)$$

Ja apskatām ūdeņraža atoma viļņu funkcijas asimptotisko izteiksmi stāvokļiem, kuru kinētiskā enerģija tiecas uz nulli (galvenais kvantu skaitlis tiecas uz bezgalību) [13], tad var atrast zināmo analogiju ar vienādojumu (63), proti:

$$R \sim \frac{1}{r^{3/4}} \cos \left(\sqrt{8 \frac{e^2 m}{\hbar^2} r - \frac{3}{4} \pi} \right) \quad (64)$$

Eksponentes arguments sistēmas (63) pirmajā vienādojumā ir tāds pats kā kosinusa arguments izteiksmē (64). Kosinusa funkcijas vieta mums ir eksponente tādēļ, ka mūsu apskatāmajā gadījumā potenciālam ir atgrūšanas daba. Attāluma lielumu (r, x) pakāpes abos gadījumos ir vienādas.

Taču ir skaidrs, ka elektrona viļņu funkcija, kas saistīta ar paša elektrona radīto lauku, ir lokalizēta nevis atomārā attālumā, bet gan stipri mazākos attālumos no centra. Tādēļ ir vērts apskatīties funkciju H un G izteiksmes pie maziem x . No izteiksmēm (57), (60) un (61) seko, ka:

$$\begin{aligned} G(x \rightarrow 0) &= \frac{c}{x^{1+\sqrt{1-\alpha^2}}} \\ H(x \rightarrow 0) &= \frac{c(1-\sqrt{1-\alpha^2})}{\alpha \cdot x^{1+\sqrt{1-\alpha^2}}} \end{aligned} \quad (65)$$

kur c – ir konstante. Abas funkcijas nullē diverģē, tāpēc ir jāizmanto modelis, kurš atļauj „sašūt” divus atrisinājumus dažādos apgabalos, proti, apgabalā no ∞ līdz kaut kādam patvaļīgam mazam x_0 darbojas Kulona potenciāls $\frac{1}{x}$, bet apgabalā no x_0 līdz nullei potenciāls ir konstants un vienāds ar $\frac{1}{x_0}$.

Izmantojot vienādojumu sistēmu (56) apgabalā no nulles līdz x_0 , varam iegūt:

$$\frac{d^2G}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dG}{dx} + p^2G = 0 \quad (66)$$

kur $p = \sqrt{\frac{\alpha^2}{x_0^2} - \frac{\alpha}{x_0}}$. Vienādojuma (66) galīgs atrisinājums nullē ir:

$$G = s \frac{\sin px}{x} \quad (67)$$

kur s – ir konstante. Lai „sašūtu” atrisinājumus, funkcijas G izteiksmju (65) un (67) logaritmiskie atvasinājumi $\frac{1}{G} \frac{dG}{dx}$ ir savstarpēji jāpielīdzina punktā $x=x_0$. Rezultāta varam iegūt transcendentu vienādojumu:

$$-\sqrt{\alpha(\alpha-x_0)} \operatorname{ctg} \sqrt{\alpha(\alpha-x_0)} = \sqrt{1-\alpha^2} \quad (68)$$

Izmantojot pirmo bezdimensionālizācijas sakarību (55), var noteikt, ka punktam, kur x_0 ir vienāds ar α , atbilst:

$$r_0 = \frac{\alpha}{2\kappa_0} = \frac{e^2}{2mc^2} = \frac{r_{kl}}{2} \quad (69)$$

kur r_{kl} ir klasiskais elektrona rādiuss. Bet punktam x_0 ir jābūt mazākam par sīkstruktūras konstanti, jo tikai šajā gadījumā elektrona radītais atgrūšanas potenciāls pie maziem r pacels virs nulles negatīvo enerģētisko spektru, kas arī ir nepieciešamais nosacījums Kleina paradoksam. Tā kā α ir mazs lielums, tad vienādojuma (68) kreisā puse tuvināti ir vienāda ar $-1 + \frac{\alpha(\alpha - x_0)}{3}$.

Varam redzēt, ka vienādojumu (68) nevar apmierināt. Tas nozīmē, ka nav tāda punkta x_0 , kurā galīgu nullē funkciju varētu gludi sašūt ar funkciju, kura bezgalībā tiecas uz nulli. Līdzīga situācija ir arī gadījumā ar trīsdimensionālo potenciālo bedri [28]: ja potenciāls ir pārāk vājš, tad saistītais stāvoklis neveidojas.

4.1.2 Diraka-Puasona vienādojumu sistēma ar robežnosacījumiem $x \rightarrow \infty$

Ja izmantojam sistēmu (54), respektīvi, klāt pievienojam arī Puasona vienādojumu, tad ar sakarībām (55) to var pārrakstīt sekojoši:

$$\begin{aligned} \frac{dG}{dx} &= (1 - \alpha U)H \\ \frac{dH}{dx} &= -\frac{2H}{x} + \alpha UG \\ \frac{d^2U}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dU}{dx} &= -(G^2 + H^2) \end{aligned} \quad (70)$$

kur pēdējos divus vienādojumus var sadalīt divos pirmās kārtas diferenciālos vienādojumos, tā lai:

$$\begin{aligned}\frac{dU}{dx} &= V \\ \frac{dV}{dx} + \frac{2}{x}V &= -(G^2 + H^2)\end{aligned}\tag{71}$$

Un nosacījumi šai problēmai izskatīsies sekojoši:

$$\begin{aligned}G(x \rightarrow \infty) &= c' \frac{\exp(-2\sqrt{\alpha x})}{x^{3/4}}; U(x \rightarrow \infty) = \frac{1}{x} \\ H(x \rightarrow \infty) &= -c' \sqrt{\alpha} \frac{\exp(-2\sqrt{\alpha x})}{x^{5/4}}; V(x \rightarrow \infty) = \frac{dU}{dx} = -\frac{1}{x^2}\end{aligned}\tag{72}$$

kur c' – ir patvaļīga konstante.

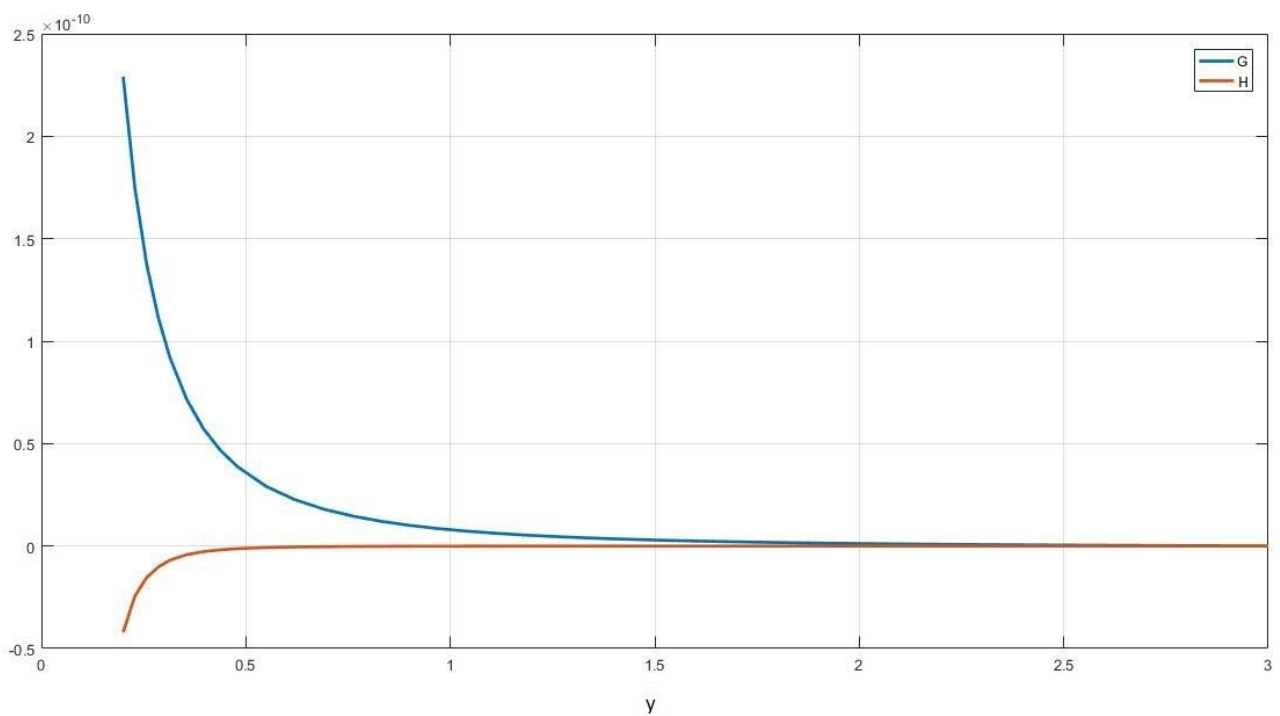
Ja ieviešam jauno mainīgo, ko apzīmējam: $y = \sqrt{\alpha x}$, tad vienādojumu sistēma izskatīsies šādi:

$$\begin{aligned}\frac{dG}{dy} &= (1 - \alpha U) \frac{2Hy}{\alpha} \\ \frac{dH}{dy} &= -\frac{4H}{y} + 2UGy \\ \frac{dU}{dy} &= \frac{2Vy}{\alpha} \\ \frac{dV}{dy} &= -\frac{2y(G^2 + H^2)}{\alpha} - \frac{4V}{y}\end{aligned}\tag{73}$$

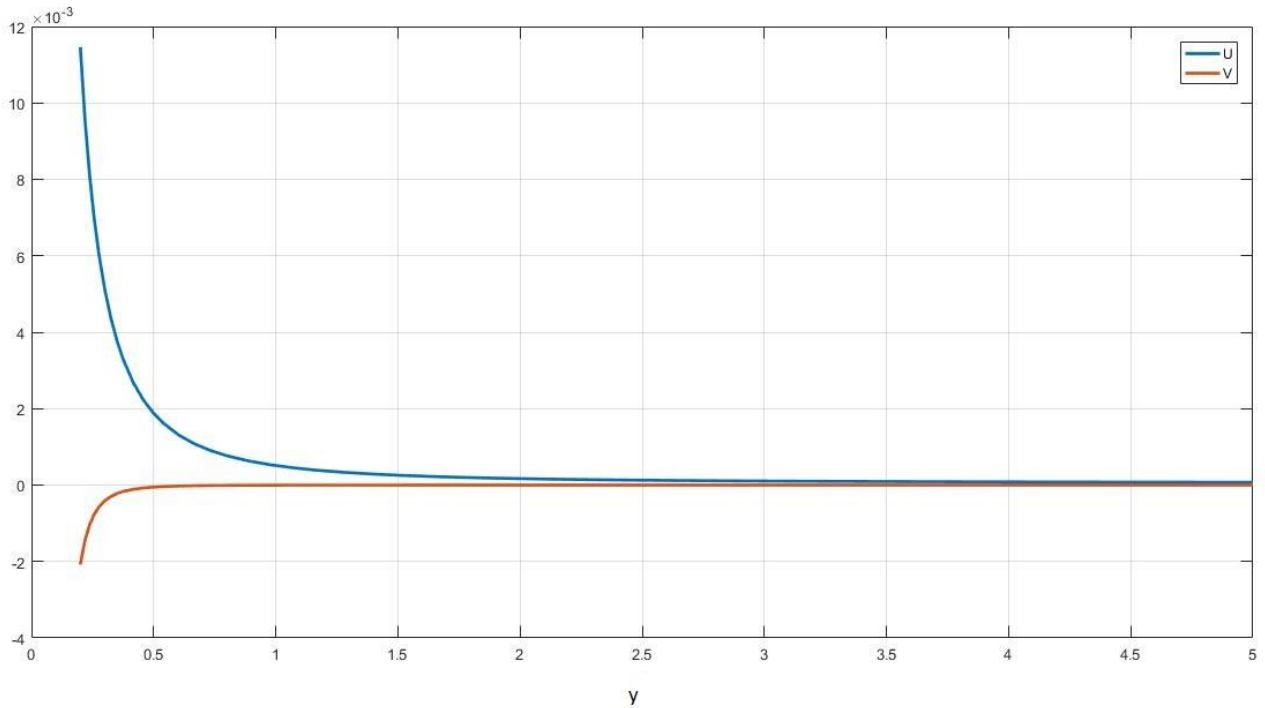
Un nosacījumi:

$$\begin{aligned}G(y \rightarrow \infty) &= \frac{c' e^{-2y} \alpha^{3/4}}{y^{3/2}} \\ H(y \rightarrow \infty) &= \frac{-c' e^{-2y} \alpha^{7/4}}{y^{5/2}} \\ U(y \rightarrow \infty) &= \frac{\alpha}{y^2} \\ V(y \rightarrow \infty) &= -\frac{\alpha^2}{y^4}\end{aligned}\tag{74}$$

Pieņemot, ka $c = 0.05$, ar Matlab programmatūru tika iegūti grafiki gan G un H funkcijām, gan arī potenciālam U un tā atvasinājumam V (att.4.1.2.1 un 4.1.2.2). Tāpat kā iepriekš, var redzēt, ka arī šeit ir novērojama diverģence nulles apgabalā. Gan funkciju G un H, gan potenciāla U un tā atvasinājuma V uzvedība ir savstarpēji līdzīga. Šāda dinamika tika novērota pie jebkurām konstantēm c . Kaut gan pie lieliem x iegūstam vēlamu uzvedību, bet tā kā mums interesē apgabals tuvāk nullei, kur ir novērojama diverģence, tad no tā izriet, ka vienīgais variants šajā situācijā būtu analizēt atrisinājumus, kas ir saistīti ar problēmu veidojošiem nosacījumiem nulles apgabalā, jo, kā var saprast, tas garantē, ka mazos attālumos funkcijas nediverģēs, bet ar nosacījumu konstanšu maiņu varētu nodrošināt potenciāla kulonisko uzvedību bezgalības apgabalā, kas arī tika darīts un tiks detalizēti apskatīts tālāk.



Att.4.1.2.1: Diraka-Puasona sistēmas (73) atrisinājumi G (zilā līkne) un H (sarkanā līkne) funkcijām pie robežnosacījumiem (74), kad $y \rightarrow \infty$, atkarībā no bezdimensionālās radiālās koordinātes y pie konstantes $c=0.05$.



Att.4.1.2.2: Diraka-Puasona sistēmas (73) atrisinājumi potenciālam U (zilā līkne) un tā atvasinājumam V (sarkanā līkne) pie robežnosacījumiem (74), kad $y \rightarrow \infty$, atkarībā no bezdimensionālās radiālās koordinātes y pie konstantes $c=0.05$.

4.1.3 Diraka-Puasona vienādojumu sistēma pie robežnosacījumiem $x \rightarrow 0$

Tādējādi šī darba otrajā posmā tika meklēti nelineāro diferenciālvienādojumu sistēmas atrisinājumi pie robežnosacījumiem $r \rightarrow 0$, proti, attēla 4.1.1 „zaļā” apgabala. Kā viegli var saprast, šim mērķim tika izvēlēti jauni nosacījumi.

Lai pilnībā noformulētu risināmo problēmu, sistēmai (70) tiek pievienoti sākuma nosacījumi pie maziem x :

$$\begin{aligned}
 G(x \rightarrow 0) &= a \\
 U(x \rightarrow 0) &= b \\
 H(x \rightarrow 0) &= \frac{\alpha ab}{3} x \\
 V(x \rightarrow 0) &= -\frac{a^2}{3} x
 \end{aligned}
 \tag{75}$$

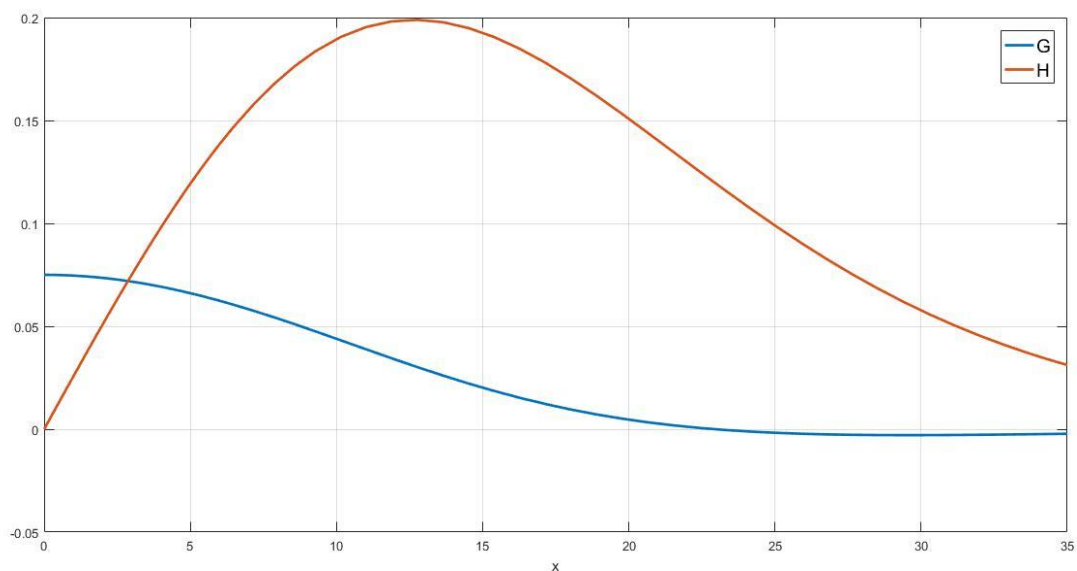
kur a un b ir patvaļīgas konstantes.

Vislabākie rezultāti ar Matlab programmēšanas palīdzību tika iegūti, izmantojot konstantes $a = 0.075$ un $b = 141$. Šajā gadījumā, kā var redzēt attēlā 4.1.3.1, G un H funkcijām nav novērojamas svārstības diezgan plašā diapazonā (līdz pat $y = 35$ un vairāk, kā redzēsīm tālāk). Attēlā 4.1.3.2 var redzēt potenciālu U un tā atvasinājumu V: potenciāls kritās diezgan mēreni, vienmērīgi, ir novērojama „pareizā” tieksme pēc Kuloniskās uzvedības lielo attālumu apgabalā. Savukārt, ja apskatām šo pašu gadījumu, bet lielākajā diapazonā, līkņu uzvedība diezgan strauji mainās. G un H funkcijas (att. 4.1.3.3) sāk ievērojami svārstīties pie $x = 105$, aptuveni, bet potenciāls U, krustojot nulli, aiziet negatīvajās vērtībās vēl nedaudz ātrāk (aptuveni pie $x = 100$) (att. 4.1.3.4).

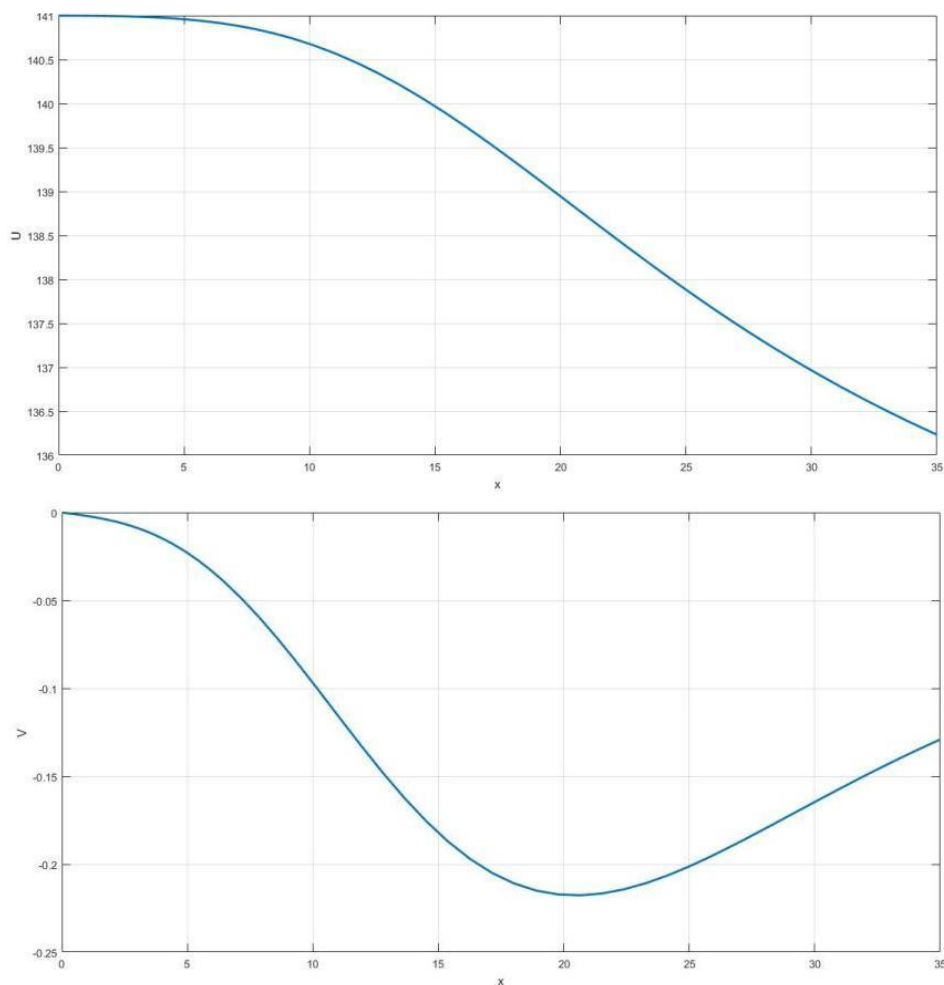
G.A.Lisi [11] ir veicis līdzīgus pētījumus, skaitliski risinot Diraka-Puasona vienādojumu sistēmu. Autors piemeklē enerģijas E vērtības, pie kurām funkcijas apmierina vienādojumu sistēmu. Pozitīvās enerģijas vērtības tika iegūtas tikai, ja sīkstruktūras konstante α ir lielāka par vieninieku. Lai novērtētu mūsu skaitlisko aprēķinu precizitāti, atkārtojām sistēmas risināšanu pie G.A.Lisi izvēlētajiem parametriem. Iegūtos rezultātus var redzēt attēlā 4.1.3.5., kuri ir identiski ar darbā [11] izmantoto citu aprēķināšanas metodi. Interesanti, ka risinot sistēmu pie lieliem attālumiem r (att. 4.1.3.6), iegūstam līdzīgu uzvedību, kā mūsu augstāk aplūkotajā gadījumā, kad funkcijas G un H sāk svārstīties un potenciāls U kļūst negatīvs. No tā varam secināt, ka atrisinājums ir jūtīgs pret konstanšu vērtībām. Nedaudz pamainot konstanšu vērtības, svārstību sākšanās tiek nobīdīta pa koordinātes asi.

Līdzīgi rezultāti G un H funkciju uzvedības ziņā ir atrodami [29], kaut gan tajā darbā enerģija Diraka vienādojumā netika pieņemta par miera enerģiju, bet gan par brīvo. Runājot par gadījumiem, kad tika izmantota miera enerģija (proti, $\kappa_0 = \kappa$), tad arī skaitliski risinot līdzīgu sistēmu [10], tika iegūti rezultāti, kas pēc savas dinamikas atgādina šī darba augstāk minētās līknes.

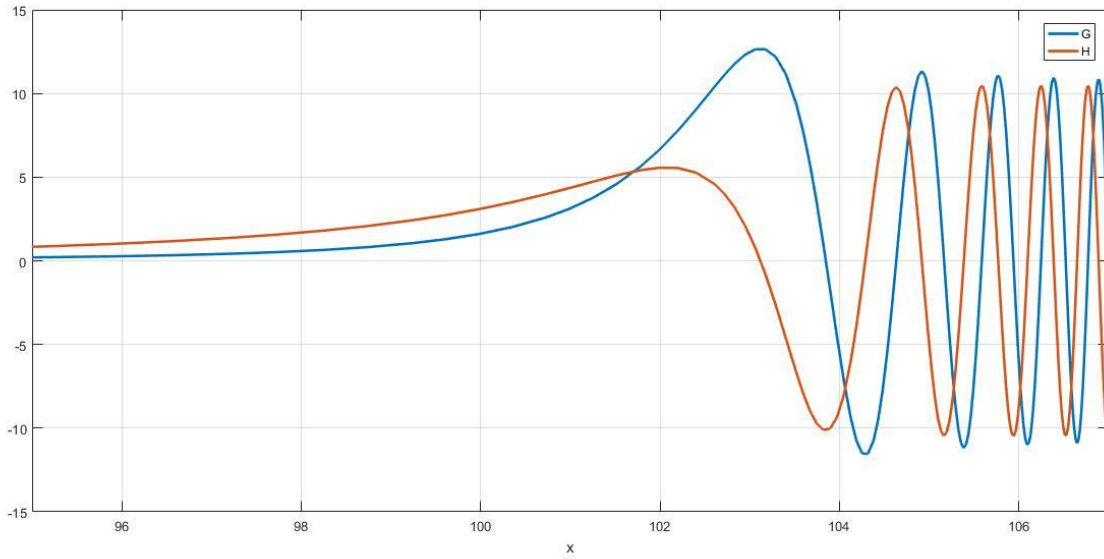
Ar konstantēm a un b tika veikti dažādi eksperimenti. Kā dažus no piemēriem, varētu minēt gadījumu, kad $a = 5, 8, 10$ un $b = 350, 400, 500$. Atšķirībā no augstāk minētajiem rezultātiem, šādu konstanšu vērtību gadījumā funkcijas G un H sāk svārstīties jau pašā sākumā un tā arī turpina tālāk (sk. att. 4.1.3.7).



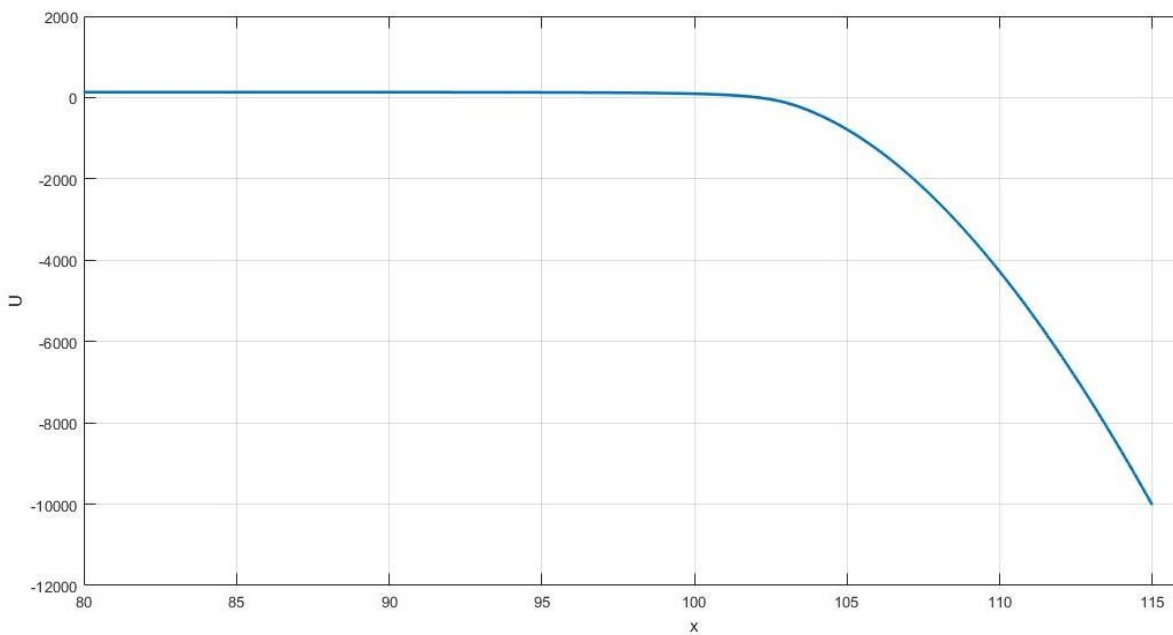
Att.4.1.3.1: Diraka-Puasona sistēmas (70) atrisinājumi G (zilā līkne) un H (sarkanā līkne) funkcijām pie robežnosacījumiem (75), kad $x \rightarrow 0$, atkarībā no bezdimensionālās radiālās koordinātes x pie konstantēm $a=0.075$ un $b=141$.



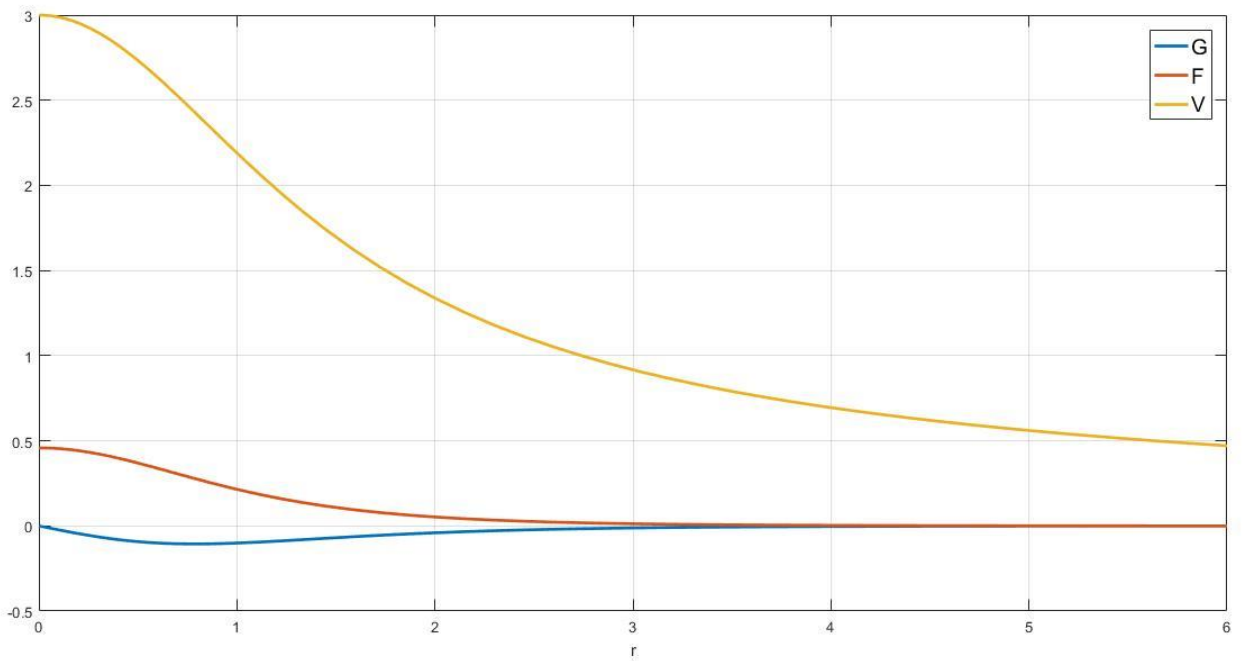
Att.4.1.3.2: Diraka-Puasona sistēmas (70) atrisinājumi potenciālam U un tā atvasinājumam V pie robežnosacījumiem (75), kad $x \rightarrow 0$, atkarībā no bezdimensionālās radiālās koordinātes x pie konstantēm $a=0.075$ un $b=141$.



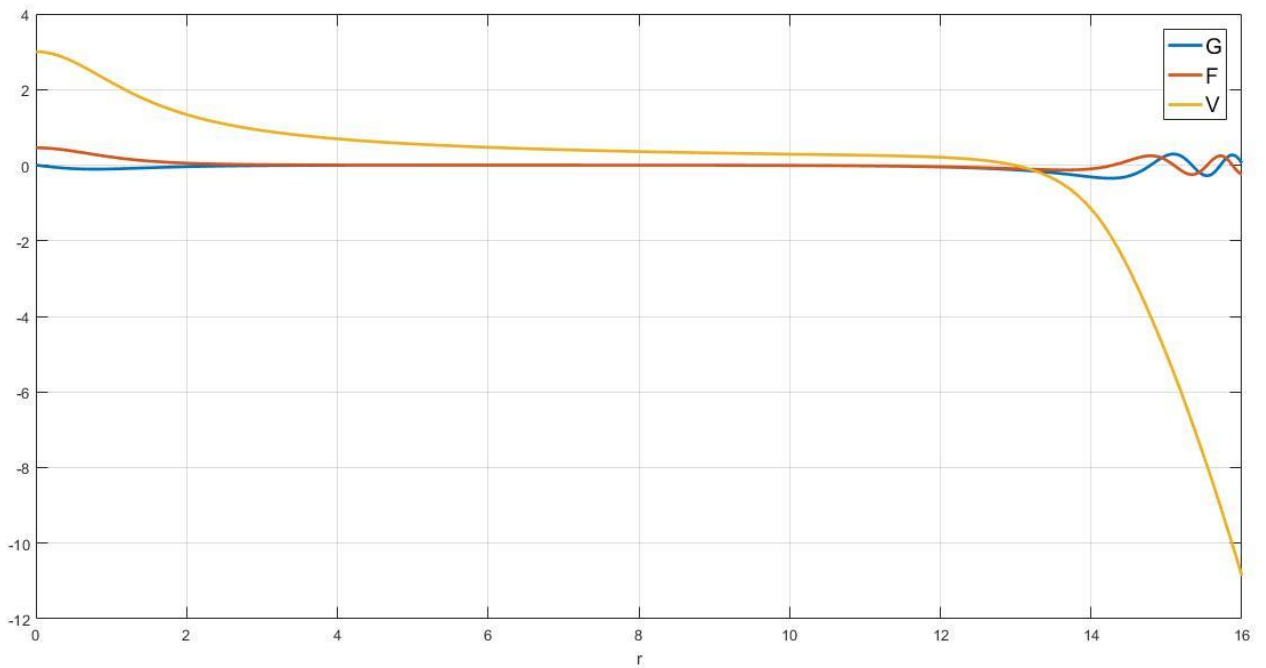
Att.4.1.3.3: Svārstību parādīšanās Diraka-Puasona sistēmas (70) atrisinājumos G (zilā līkne) un H (sarkanā līkne) funkcijām pie robežnosacījumiem (75), kad $x \rightarrow 0$, pie konstantēm $a=0.075$ un $b=141$.



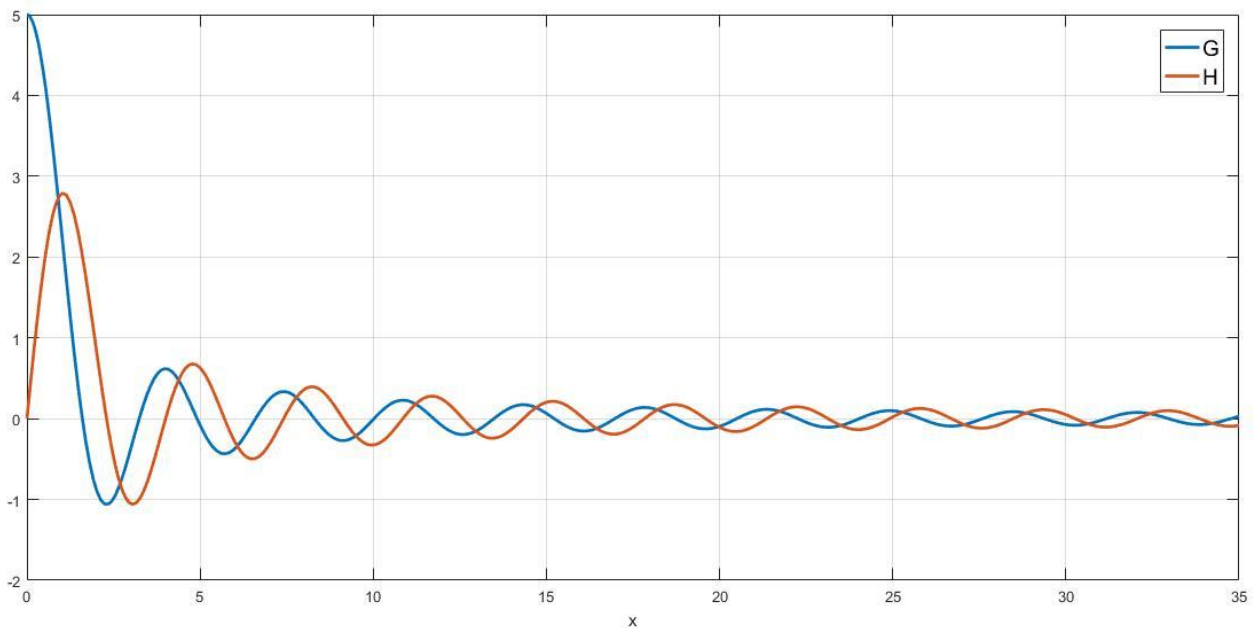
Att.4.1.3.4: Potenciāla U kritums Diraka-Puasona sistēmas (70) atrisinājumā pie robežnosacījumiem (75), kad $x \rightarrow 0$, pie konstantēm $a=0.075$ un $b=141$.



Att.4.1.3.5: Darba [11] Diraka-Puasona sistēmas atrisinājuma pie robežnosacījumiem $x \rightarrow 0$ atkārtoti rezultāti G un F funkcijām, kā arī potenciālam V.

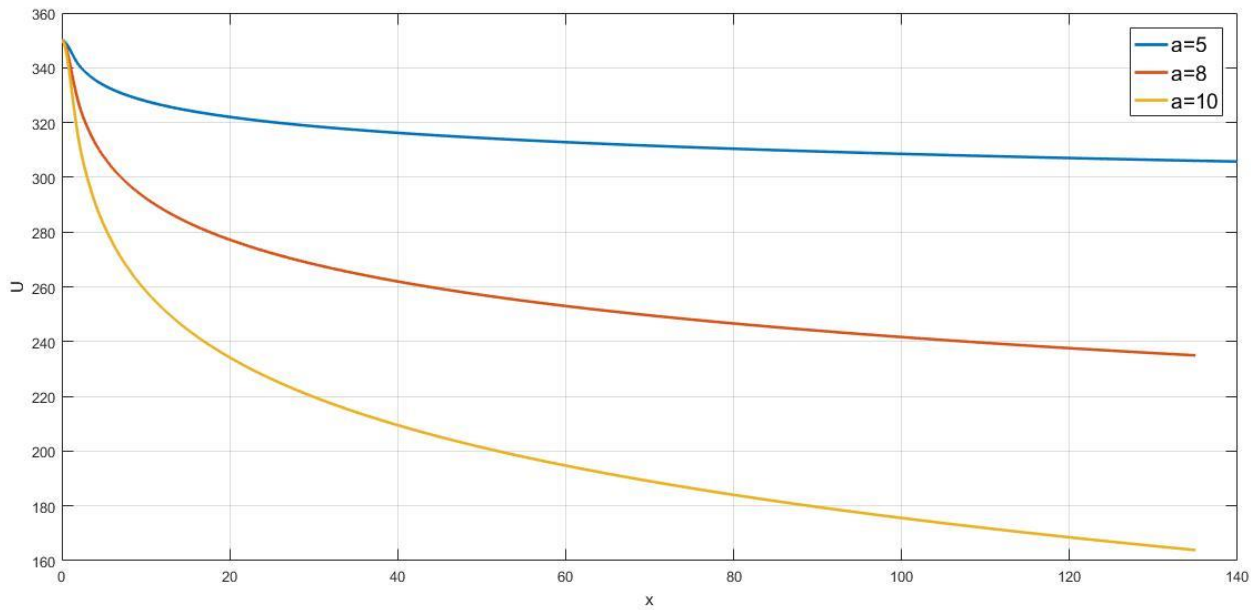


Att.4.1.3.6: Svārstību parādīšanās darba [17] Diraka-Puasona sistēmas atrisinājumam pie robežnosacījumiem $x \rightarrow 0$ atkārtotajos rezultātos G un F funkcijām, kā arī potenciālam V.

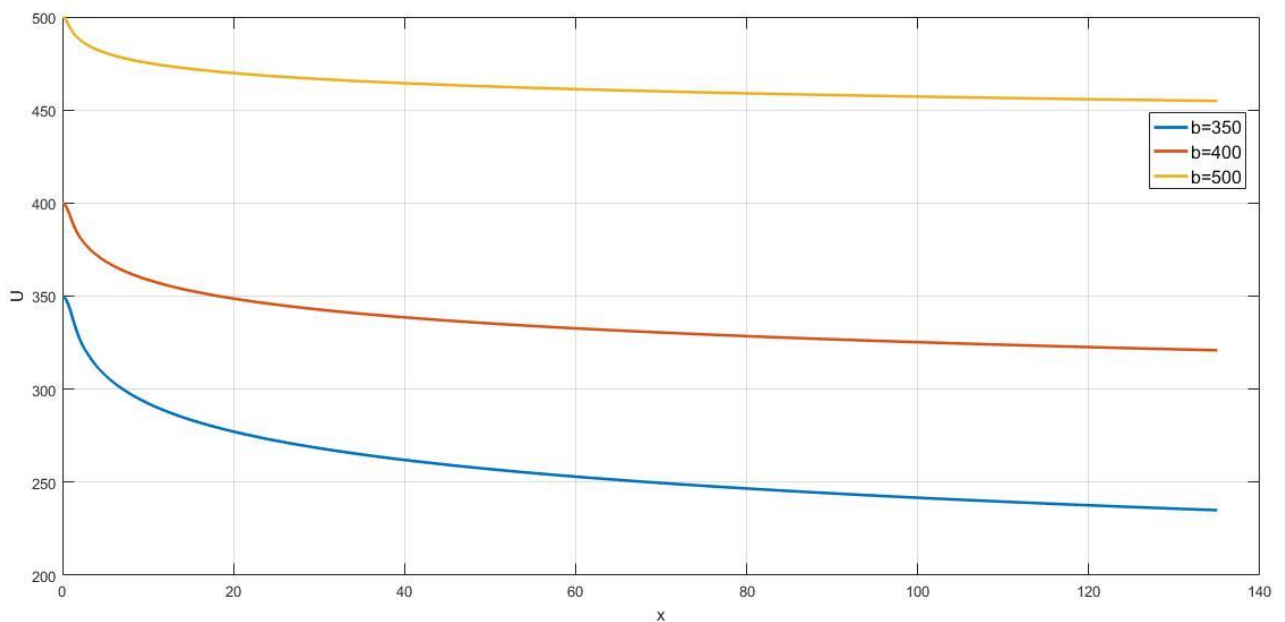


Att.4.1.3.7: Diraka-Puasona sistēmas (70) atrisinājumi G (zilā līkne) un H (sarkanā līkne) funkcijām pie robežnosacījumiem (75), kad $x \rightarrow 0$, atkarībā no bezdimensionālās radiālās koordinātes x pie konstantēm $a=5$ un $b=350$.

Savukārt, potenciāls U ir ļoti stabils – tas nekrīt negatīvajās vērtībās pat ļoti lielos attālumos. Potenciāla līknes forma atšķiras no tās, kura tika iegūta iepriekšējā gadījumā pie mazākām a un b konstantēm – tā nav tik stāva, un tāpēc arī nav tendēta uz ātru „sabrukšanu” negatīvajās vērtībās. Attēlā 4.1.3.8 var redzēt dažādu potenciāla U līkņu salīdzinājumu konstantes a maiņas gadījumā pie nemainīgā $b = 350$. Var redzēt, ka jo lielāka ir konstante a , jo ātrāk potenciāls tieksies uz nulli. Un tieši pretēja situācija ir novērojama b konstantes variēšanas gadījumā pie nemainīgā $a=8$: jo lielāka ir b vērtība, jo lēnāk dilst potenciāls U (att.4.1.3.9). Izskatās, ka nav iespējams atrast tādas robežnosacījumu konstantes, lai iegūtu fizikāli derīgu atrisinājumu: galīgas funkcijas pie $x=0$, bet pie lieliem x eksponenciāli dilstošas funkcijas G un H un atgrūšanas potenciālu U , kas tiecas uz Kulona potenciālu. Varbūt, ka elektrona magnētiskā momenta ievērošana var ienest kaut kādas izmaiņas. Turpmāk tas arī tiks darīts.



Att.4.1.3.8: Diraka-Puasona sistēmas (70) atrisinājuma pie robežnosacījumiem $x \rightarrow 0$ potenciālu salīdzinājums dažādu konstantes a vērtību gadījumā (pie $b=350$).



Att.4.1.3.9: Diraka-Puasona sistēmas (70) atrisinājuma pie robežnosacījumiem $x \rightarrow 0$ potenciālu salīdzinājums dažādu konstantes b vērtību gadījumā (pie $a=8$).

4.2 Vektorpotenciāls

Kā jau bija minēts, iepriekš mēs apskatījām tikai skalāro potenciālu, proti, fizikālo lielumu, kas tiek definēts, izmantojot elektrona lādiņu. Savukārt, ja gribam ņemt vērā arī tādus elektrona raksturlielumus kā magnētiskais moments, tad šajā gadījumā ir jāapskata un, attiecīgi, jāiekļauj Diraka vienādojumā arī vektorpotenciāls \vec{A} , kurš šoreiz jau nebūs vienāds ar nulli, kā mēs to pieņemam iepriekš.

Ja kaut kādā galīgā apgabalā plūst strāva, tad šīs strāvas radītais elektromagnētiskā lauka vektorpotenciālu tālu no šī apgabala nosaka izteiksme [21, 30]:

$$\vec{A} = \frac{[\vec{\mu} \times \vec{r}]}{r^3} = -[\vec{\mu} \times \nabla \frac{1}{r}] \quad (76)$$

kur \vec{r} - ir attālums no apgabala centra līdz apskatāmajam punktam, $\vec{\mu}$ - sistēmas magnētiskais moments, kuru nosaka integrālis pa visu apgabalu no rādiusvektora un strāvas blīvuma vektoriālā reizinājuma. Bet runājot par tādām daļiņām kā elektrons šī darba ietvaros, ir jāatzīmē, ka to magnētiskais moments, kā zināms, nav saistīts ar strāvām, bet gan ar spinu. Tāpēc izmantosim darbā [13] doto elektrona magnētiskā momenta definīciju:

$$\vec{\mu} = -\mu_0 \vec{\sigma}^P \quad (77)$$

kur μ_0 ir Bora magnetons. Tādēļ izvēlēsimies modeli, kurā elektrona magnētiskā momenta radīto lauka vektorpotenciālu var uzrakstīt kā operatoru sekojošā formā:

$$\vec{A} = \mu_0 [\vec{\sigma}^P \times \vec{\nabla} h(r)] \quad (78)$$

kur $h(r)$ ir funkcija ar apgriezto attāluma dimensiju. Ievietojot (78) Diraka vienādojumā (15), kā arī izmantojot sakarību: $[\vec{\sigma}^P \times \vec{\sigma}^P] = 2i\vec{\sigma}^P$, un pieņemot ka funkcija h ir centrāli simetriska, proti, $h=h(r)$, vienādojumus (49) var pārrakstīt šādi:

$$\begin{aligned}
[\kappa + \kappa_0 - \alpha F]f &= \left[\frac{d}{dr} - \alpha \frac{d}{dr} \left(\frac{h}{\kappa_0} \right) \right] g \\
[\kappa - \kappa_0 - \alpha F]g + \left[\frac{d}{dr} + \frac{2}{r} - \alpha \frac{d}{dr} \left(\frac{h}{\kappa_0} \right) \right] f &= 0
\end{aligned} \tag{79}$$

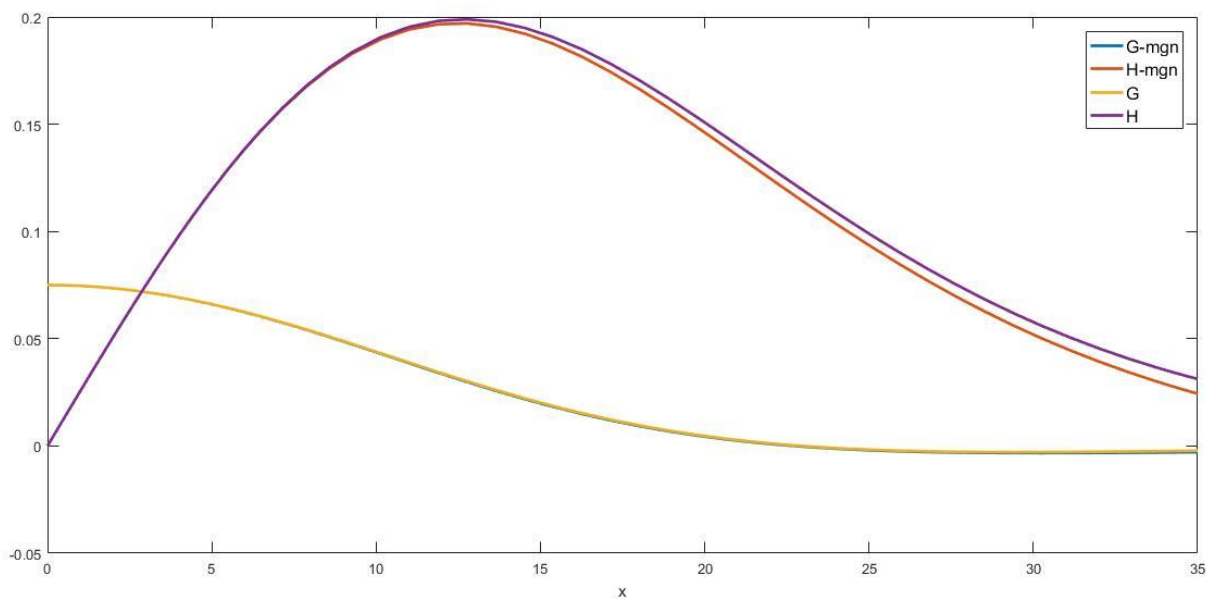
Tā kā mums nav vienādojuma funkcijas $h(r)$ noteikšanai, tad izvēlamies, ka $h=F$. Izmantojot tās pašas bezdimensionalizācijas sakarības (55), varam dabūt jaunu vienādojumu sistēmu, kur vienādojumi, kas ir saistīti ar potenciālu, kā var saprast, nemainās:

$$\begin{aligned}
\frac{dG}{dx} &= (1 - \alpha U)H - 2\alpha GV \\
\frac{dH}{dx} &= 2\alpha HV - \frac{2H}{x} + \alpha GU \\
\frac{dU}{dx} &= V \\
\frac{dV}{dx} &= -\frac{2V}{x} - (G^2 + H^2)
\end{aligned} \tag{80}$$

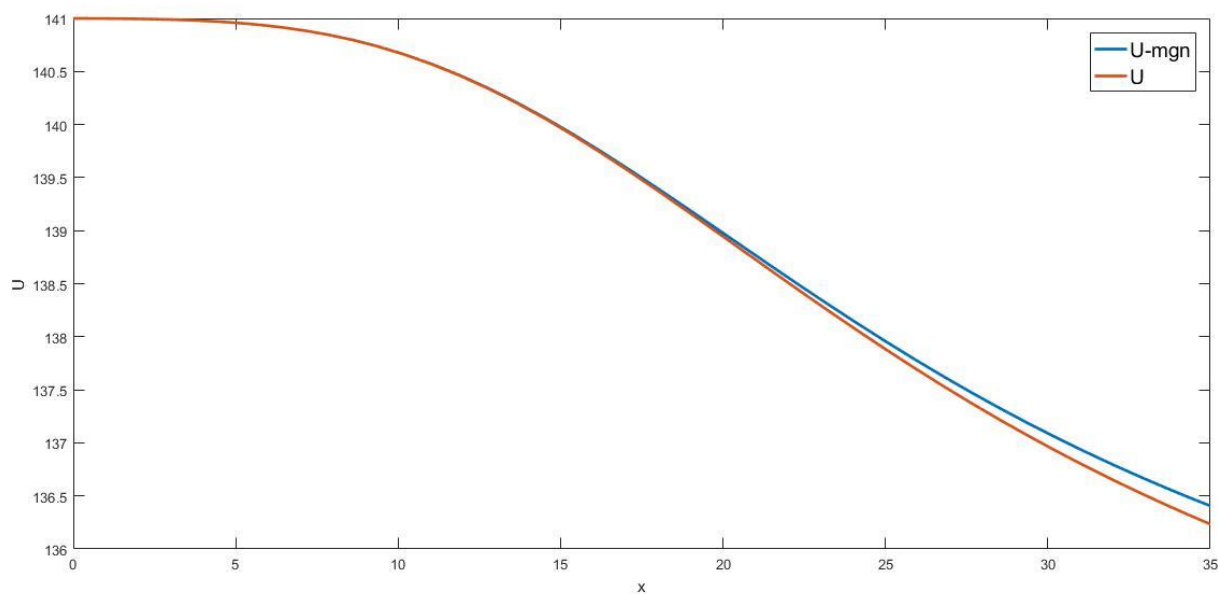
Nosacījumi nulles apgabalam (75) tika saglabāti. Lai korekti salīdzinātu iegūtos rezultātus ar tiem, kur tika risināti vienādojumi, neievērojot magnētisko momentu, bez šaubām, bija jāizmanto tās pašas a un b konstantes. Attēlā 4.2.1 var redzēt G un H funkcijas pie parametriem $b = 141$ un $a = 0.075$ gan ņemot vērā magnētisko momentu, gan bez tā.

Var redzēt, ka G funkcijas ir praktiski identiskas, tās gandrīz saplūda kopā un ir grūti atdalāmas viena no otrās. Savukārt, H funkcijām ir neliela nobīde lielo attālumu apgabalā – atrisinājumam bez magnētiskā momenta ir nedaudz mazākas vērtības.

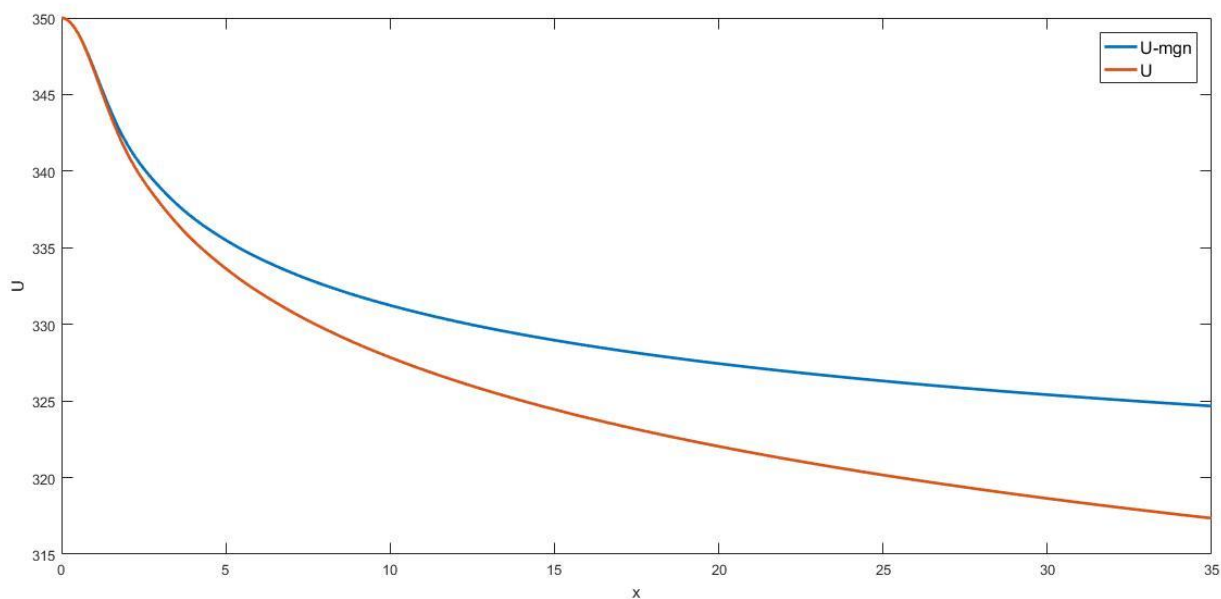
Attēlā 4.2.2 nav novērojama liela atšķirība arī starp potenciāliem, tāpat kā funkcijām lielu attālumu apgabalā magnētiskā momenta atrisinājuma līknei ir nedaudz lielākas vērtības. Aina nedaudz mainās, ja nosacījumu konstantes tiek izvēlētas tā, lai $b = 350$ un $a = 5$. Potenciāls, kas ir saistīts ar magnētiskā momenta atrisinājumu, joprojām rāda lielākas vērtības nekā „parastais”, bet nobīde jau ir diezgan ievērojama (att. 4.2.3).



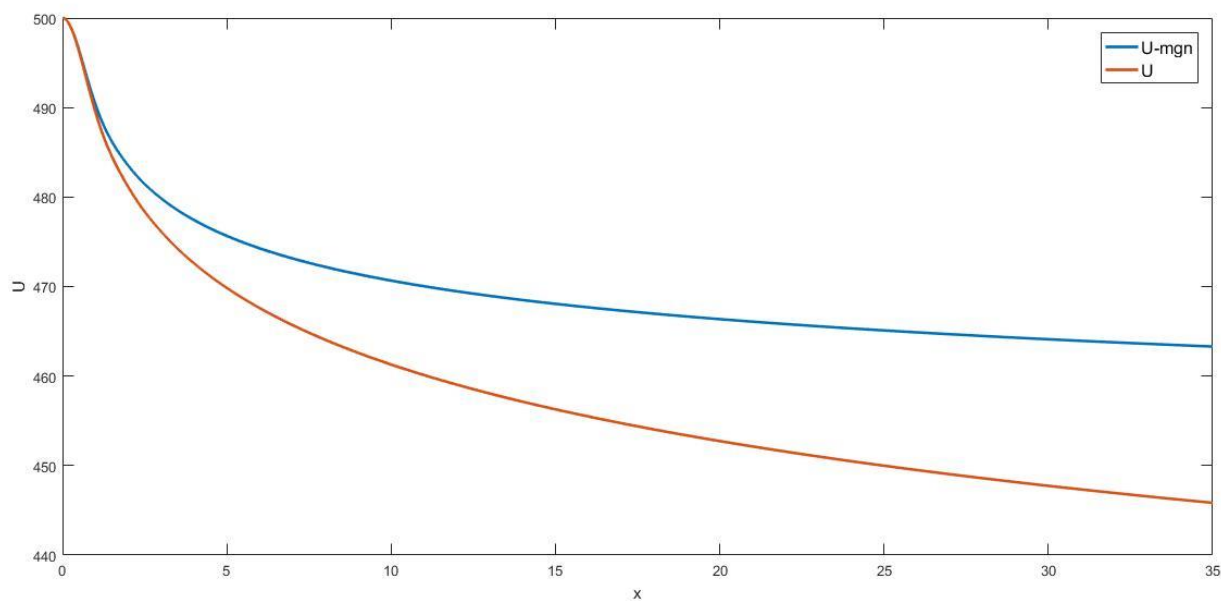
Att.4.2.1: Diraka-Puasona sistēmas (80) atrisinājuma G un H funkciju salīdzinājums gadījumiem ar un bez magnētiskā momenta ievērošanas pie robežnosacījumiem (75), kad $x \rightarrow 0$, atkarībā no bezdimensionālās radiālās koordinātes x pie konstantēm $a=0.075$ un $b=141$.



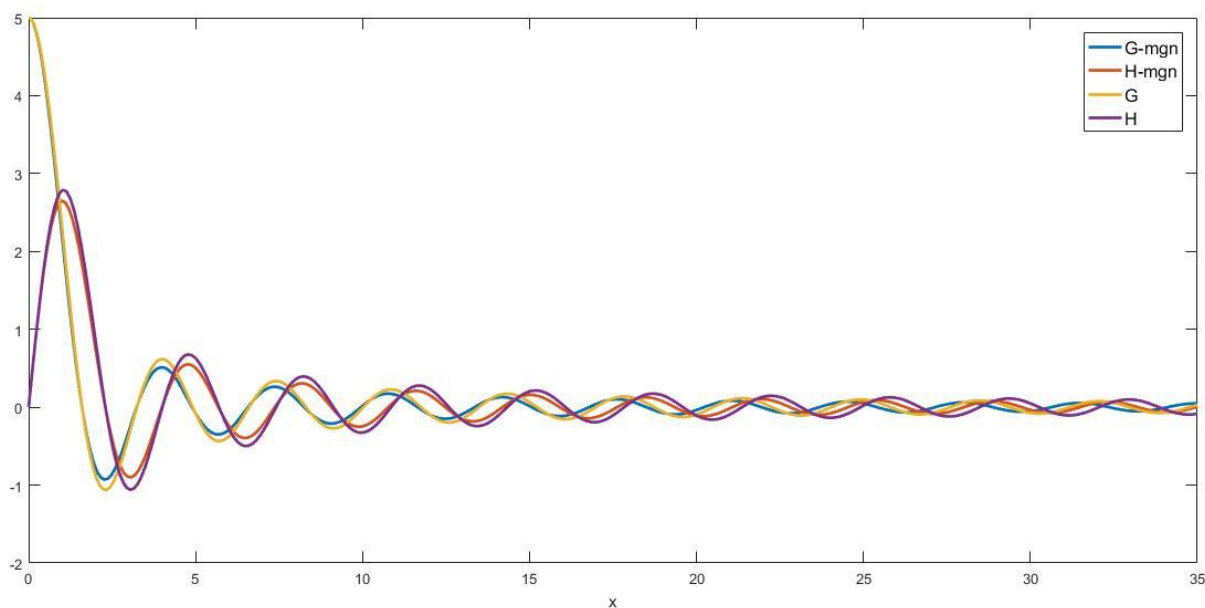
Att.4.2.2: Diraka-Puasona sistēmas (80) atrisinājuma potenciālu U salīdzinājums gadījumiem ar un bez magnētiskā momenta ievērošanas pie robežnosacījumiem (75), kad $x \rightarrow 0$, atkarībā no bezdimensionālās radiālās koordinātes x pie konstantēm $a=0.075$ un $b=141$.



Att.4.2.3: Diraka-Puasona sistēmas (80) atrisinājuma potenciālu U salīdzinājums gadījumiem ar un bez magnētiskā momenta ievērošanas pie robežnosacījumiem (75), kad $x \rightarrow 0$, atkarībā no bezdimensionālās radiālās koordinātes x pie konstantēm $b=350$ un $a=5$.



Att.4.2.4: Diraka-Puasona sistēmas (80) atrisinājuma potenciālu U salīdzinājums gadījumiem ar un bez magnētiskā momenta ievērošanas pie robežnosacījumiem (75), kad $x \rightarrow 0$, atkarībā no bezdimensionālās radiālās koordinātes x pie konstantēm $b=500$ un $a=10$.



Att.4.2.5: Diraka-Puasona sistēmas (80) atrisinājuma G un H funkciju salīdzinājums gadījumiem ar un bez magnētiskā momenta ievērošanas pie robežnosacījumiem (75), kad $x \rightarrow 0$, atkarībā no bezdimensionālās radiālās koordinātes x pie konstantēm $b=350$ un $a=5$

Ja konstanšu vērtības palielina līdz $b = 500$ un $a = 10$, atšķirība starp potenciālu līknēm vēl krasāk izpaužas. Tātad magnētiskā momenta ievērošana padara atrisinājumu potenciālam stabilāku, un jo lielākas ir nosacījumu konstantes, jo stabilāks tas ir. Kas attiecas uz funkciju G un H salīdzinājumu gadījumam, kad konstante $b = 350$ un $a = 5$, tad, kā var redzēt attēlā 4.2.5., tās ir gandrīz identiskās. Tātad magnētiskā momenta ievērošana šajā gadījumā nedod praktiski nekādu ieguldījumu.

Ja vērtējam magnētiskā momenta faktora ietekmi uz sistēmas atrisinājumu kopumā, tad nekādas būtiskas izmaiņas līkņu principiālā uzvedībā tas nedod. Šī atziņa sakrīt ar to, kas tika secināts arī darbā [11].

5 SECINĀJUMI UN KOPSAVILKUMS

1. Tika apgūta Diraka elektrona teorija un izpētīta Kleina paradoksa būtība.
2. Tika izanalizēti darbi, kuros veikti Diraka-Maksvela vienādojumu sistēmas skaitliskie aprēķini. Šī sistēma ir interesanta arī matemātiķiem, kuri ir veltījuši tās izpētei daudzus darbus, bet kurus gan ir diezgan grūti pilna mērā izprast fiziķim.
3. Darba mērķis ir skaitliski risināt Diraka-Maksvela vienādojumu sistēmu ar nolūku iegūt atrisinājumu, kuram funkcijas ir galīgas sākumpunktā, bet bezgalībā eksponenciāli diltu, bet atgrūšanas potenciāls tiektos uz Kulona potenciālu. Tiek pieņemts, ka elektrons ir miera stāvoklī, uz viņu nedarbojas ārējie lauki, bet tikai paša radītais elektromagnētiskais lauks. Kā arī tiek pieņemts, ka elektrona pilnā enerģija ir vienāda ar elektrona miera enerģiju.
4. Analītiski tika pierādīts, ka vienkāršā modelī, kurā ir tīri Kulona potenciāls, kurš aizvietots ar konstanti pie maziem attālumiem, nav iespējams gludi „sašūt” funkcijas ar pareizu uzvedību attiecīgi nullē un bezgalībā.

Skaitliski risinot sistēmu ar definētiem robežnosacījumiem bezgalībā, neizdevās atrast atrisinājumu, kurš nediverģētu sākuma punktā. Tā kā sākumpunkta apkārtnē šajā uzdevumā ir svarīgāka, tad tika veikti aprēķini uzdodot robežnosacījumus sākumpunktā. Mainot konstantes nosacījumus, tika iegūti 2 atrisinājuma uzvedības modeļi:

1. Diezgan plašs koordināšu apgabals, kurā funkcijas ir gludas un potenciāls ir atgrūdošs, bet kādā punktā tas strauji maina zīmi un funkcijas sāk svārstīties
2. Atgrūšanas potenciāls lēnām dilst, bet funkcijas sāk svārstīties jau pie mazām koordināšu vērtībām. Tādējādi šādā modelī neizdevās atrast fizikāli derīgu atrisinājumu.

Tika risināta pilnā Diraka-Maksvela vienādojumu sistēma, piedāvājot specifisku magnētiskā momenta radītā vektorpotenciāla modeli, bet tas būtiski nemainīja iegūtos rezultātus.

5. Iegūtie skaitliskie rezultāti ļoti labi sakrīt ar citā darbā ar citu skaitlisko metodi iegūtajiem rezultātiem.
6. Aprēķinu negatīvais rezultāts vedina uz domām, ka Diraka-Maksvela vienādojumu sistēma, kurā uz elektronu darbojas paša radītais elektromagnētiskais lauks, nav derīga elektrona struktūras izskaidrošanai. Šo sistēmu var iegūt variējot Lagranžiānu, kā neatkarīgos mainīgos uzskatot viļņu funkciju un lauka potenciālu. Tā var darīt, ja lauks ir ārējais fotona vai atoma kodola lauki. Bet elektronā viļņu funkcija un paša radītais lauks ir saistīti, tie nav atdalāmi. Tādēļ ir vajadzīga cita pieeja, kas arī varētu kļūt par nākotnes teorētisko pētījumu uzdevumu šajā jomā.

Pateicības

Izsaku pateicību darba vadītājam Dr. habil. Phys. Imantam Bērsonam par teorētiskajām diskusijām, lielisku iespēju pilnveidoties analītisko rēķinu apgūšanā, kā arī par ļoti interesantu maģistra darba tēmu, kas ļāva iegūt jaunas zināšanas.

Kā arī pateicos Dr. Phys. Ritai Veilandeī par noderīgiem norādījumiem, dalīšanos profesionālajā pieredzē un iespēju kontrolēt skaitlisko rēķinu precizitāti.

Izmantotā literatūra

[1] **Milloni, P.W.** *The quantum vacuum: an introduction to quantum electrodynamics*, Academic Press, San Diego, 1994.

[2] **Бете, Г.** *Квантовая Механика*, Москва: Издательство «Мир», 1965.

[3] **Dugne, J-J., Fredriksson, S., Hansson, J., Predazzi, E.** Preon trinity – a new model of leptons and quarks, *Europhysics Letters, Volume 60* (2002), №2.

[4] **Brodsky, S.J., Drell, S.D.** Anomalous magnetic moment and limits on fermion substructure, *Phys. Rev. D* 22, (1980) 2236.

[5] **Beringer, J., et al.** Review of particle physics, *Phys. Rev. D* 86, (2012). 010001.

[6] **Oleinik, V.P.** Nonlinear Quantum Dynamical Equation for the Self-Acting Electron, *Photon and Poincare group, Nova Science Publishers, Inc., New York*, (1999), p. 188-200.

[7] **Bersons, I., Veilande, R., Pirktinsh, A.** 3D collinearly propagating solitons, *Phys.Scr.* 89, (2014) 045102.

[8] **Bersons, I.** Soliton model of the photon, *Latvian journal of physics and technical sciences*, 2013, N2, p. 60-67.

[9] **Bersons, I., Veilande, R.** Nonlinear models of electric charge and magnetic moment, *Found. Phys.* 45 (2015) 1526.

[10] **Wakano, M.** Intensely localized solutions of the classical Dirac-Maxwell field equations, *Progress of Theoretical Physics, Vol. :35* (1966) No. 6, June.

[11] **Lisi, Garrett A.** A solitary wave solution of the Maxwell-Dirac equations, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 28 (1995), 5385-5392.

[12] **Radford, C.J.** The stationary Maxwell-Dirac equations, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 36 (2003), 5663-5681.

[13] **Бете, Г., Солпитер, Э.** *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Москва: Государственное издательство физико-математической литературы, 1960.

[14] **Good, R.H.** Reviews of Modern Physics, *Jr. Rev. Mod. Phys.* 27 (1955) 187

[15] **Dirac, P.A.M.,** *The principles of Quantum Mechanics*, 3rd ed., Oxford, 1947.

[16] **Condon, E.U., Shortley, G.H.,** *Theory of Atomic Spectra*, Cambridge, 1951.

- [17] **Паули, В.**, *Общие принципы волновой механики*, Гостехиздат, Москва, 1947.
- [18] **Зоммерфельд, А.** *Строение атома и спектры, II том*, Friedr. Vieweg & Sohn, Braunschweig, 1951.
- [19] **Sauter, F.** Über das Verhalten eines Elektrons im homogenen elektrischen Feld nach der relativistischen Theorie Diracs, *Zeitschrift für Physik* 69 (1931), 742-764
- [20] **Schmidt, W.G.** *Quantenmechanik II*, Universität Paderborn, Lehrstuhl für Theoretische Physik, 2014.
- [21] **Landau, L.D., Lifshitz, E.M.** *Electrodynamics of Continuous Media*, Pergamon Press, Oxford, London, New York, Paris, 1960.
- [22] **Ding, Y.H., Xu, T.** On semi-classical limits of ground states of a nonlinear Maxwell-Dirac system, *Calc. Var. Part. Diff. Equa.*, 51 (2014), 17-44.
- [23] **Zhang, J., Zhang, W., Tang, X.** Existence and multiplicity of solutions for nonlinear Dirac-Poisson systems, *Electronic Journal of Differential Equations*, Vol. 2017 (2017), No. 91, pp. 1-17.
- [24] **Zhang, J., Tang, X.H., Zhang, W.** Ground state solutions for a class of nonlinear Maxwell-Dirac system, *Topol. Meth. Nonl. Anal.*, 46 (2015), 785-798.
- [25] **Elster, C.** *Lectures on relativistic quantum mechanics*, Ohio University, 2006.
- [26] **Камке, Э.** *Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям*, Наука: Гл. ред. физ.-мат. лит., 1971.
- [27] **Бейтман, Г., Эрдейи, А.** *Высшие трансцендентные функции, Т.2*, Наука: Гл. ред. физ.-мат. лит., 1973.
- [28] **Шифф, Л.** *Квантовая Механика*, Издательство иностранной литературы, 1959.
- [29] **Bohun, Sean C., Cooperstock, F.I.** Dirac-Maxwell solitons, *Physical Review*, Vol. 60 (1999), No.6.
- [30] **Ландау, Л.Д., Лифшиц, Е.М.** *Теория поля*, Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1988.

Maģistra darbs „Uz Kleina paradoksu balstīta nelineārā elektrona modeļa izpēte”
izstrādāts LU Atomfizikas un Spektroskopijas institūtā.

Ar savu parakstu apliecinu, ka pētījums veikts patstāvīgi, izmantoti tikai tajā
norādītie informācijas avoti un iesniegtā darba elektroniskā kopija atbilst izdrukai.

Autore: Danuta Rudakovska

Rekomendēju darbu aizstāvēšanai

Darba vadītāji: Dr. habil. Phys. Imants Bērsone

Recenzents: asociētais profesors, Dr. Phys. Vjačeslavs Kaščejevs

Darbs iesniegts fizikas nodaļā 2017.gada „.....”. jūnijā

Metodiķe:

Darba aizstāvēts maģistru gala pārbaudījuma komisijas sēdē

2017. gada „.....”. jūnijā ar atzīmi

Protokola Nr.