Лекция 15
Уравнение Дирака

1 Обоснование уравнения

Теперь попытаемся построить релятивистское уравнение в виде уравнения Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \widehat{H}\Psi, \tag{1}$$

т.е. в виде уравнения первого порядка по временной производной. Ввиду того, что в релятивистском случае координаты и время выступают на равных, оператор Гамильтона $\widehat{H}$ также должен быть линейным и по пространственным производным. В результате пишем

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i}\left(\alpha_1\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial\Psi}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial\Psi}{\partial z}\right) + \beta mc^2\Psi, \tag{2}$$

где α_1, α_2, α_3 и β — некоторые, пока неизвестные, коэффициенты.

Потребуем, чтобы уравнение (2) сводилось к уравнению КГФ. Это накладывает определенные ограничения на коэффициенты α_1, α_2, α_3 и β. Для нахождения этих ограничений возьмем производную по времени от левой и правой частей уравнения (2)

$$\begin{aligned}
&-\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = \\
&= \left[\frac{\hbar c}{i}\left(\alpha_1\frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial}{\partial z}\right) + \beta mc^2\right]\left[\frac{\hbar c}{i}\left(\alpha_1\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial\Psi}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial\Psi}{\partial z}\right) + \beta mc^2\Psi\right] = \\
&= \left(\frac{\hbar c}{i}\right)^2\sum_{i,j=1}^{3}\frac{1}{2}(\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i)\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^i\partial x^j} + \hbar^2 c^3 m\sum_{i=1}^{3}(\alpha_i\beta + \beta\alpha_i)\frac{\partial\Psi}{\partial x^i} + \beta^2 m^2 c^4\Psi.
\end{aligned} \tag{3}$$

Для того, чтобы это уравнение совпадало с уравнением КГФ необходимо наложить следующие ограничения на коэффициенты

$$\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 2\delta_{ij}, \tag{4}$$

$$\alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0, \tag{5}$$

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = 1. \tag{6}$$

Очевидно, что обычные комплексные числа не могут удовлетворять таким соотношениям. Поэтому следует считать их матрицами. В дальнейшем величины $\vec{\alpha} \equiv (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ и β будем называть матрицами Дирака.

Отметим следующие свойства матриц Дирака:

1. $\vec{\alpha}$ и β должны быть эрмитовы. Это вытекает из требования эрмитовости гамильтониана $\widehat{H} = \frac{\hbar c}{i}\vec{\alpha}\nabla + \beta mc^2$.

2. Собственные значения матриц $\vec{\alpha}$ и β должны равняться ± 1. Это сразу следует из (6).

3. След $\vec{\alpha}$ матриц равен нулю. Действительно из (5) и (6) получим

$$\mathrm{Tr}(\alpha_i) = -\mathrm{Tr}(\beta\alpha_i\beta) = -\mathrm{Tr}(\alpha_i\beta^2) = -\mathrm{Tr}(\alpha_i), \tag{7}$$

т.е. $\mathrm{Tr}(\alpha_i) = 0$.

4. Матрицы Дирака должны иметь четную размерность. Действительно, из свойства 2 следует, что в диагональном представлении матрицы α_i, последняя представляет матрицу, у которой по диагонали стоят только $+1$ или -1. Тогда для того, чтобы след матрицы равнялся нулю (свойство 3 для матриц Дирака), необходимо, чтобы на ее диагонали стояло одинаковое число $+1$ и -1. Иными словами, матрица должна иметь четное число строк и столбцев.

Размерность матриц 2×2 не подходит, т.к. в этом имеется только три антикоммутирующих матрицы, матрицы Паули. Однако начиная с размерности 4×4 такие матрицы могут быть найдены. В частности, им удовлетворяет набор

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{8}$$

При этом волновая функция представляет собой черырехмерную матрицу-столбец

$$\Psi(t, \vec{x}) = \begin{pmatrix} \Psi_1(t, \vec{x}) \\ \Psi_2(t, \vec{x}) \\ \Psi_3(t, \vec{x}) \\ \Psi_4(t, \vec{x}) \end{pmatrix}. \tag{9}$$

Она называется дираковским спинором. Эрмитово-сопряженный дираковский спинор представляет черырехмерную матрицу-строку

$$\Psi^+(t, \vec{x}) = \left(\Psi_1^*(t, \vec{x}), \Psi_2^*(t, \vec{x}), \Psi_3^*(t, \vec{x}), \Psi_4^*(t, \vec{x})\right). \tag{10}$$

2 Уравнение непрерывности

Умножим слева уравнение Дирака (2) на Ψ^+

$$\Psi^+ i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i} \Psi^+ \vec{\alpha}\, \nabla \Psi + \Psi^+ \beta m c^2 \Psi. \tag{11}$$

Теперь произведем эрмитовое сопряжение уравнения Дирака (2) и умножим справа полученное уравнение на Ψ

$$-\Psi^+ i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar c}{i} \Psi^+ \vec{\alpha}\, \nabla \Psi + \Psi^+ \beta m c^2 \Psi. \tag{12}$$

Отнимая от уравнения (11) уравнение (12) получим

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^+\Psi) = -c\nabla\left(\Psi^+ \vec{\alpha}\, \Psi\right). \tag{13}$$

Вводя обозначения для плотности заряда и тока

$$\rho(t, \vec{x}) = q_0(\Psi^+\Psi) \quad \text{и} \quad \vec{j}(t, \vec{x}) = q_0 c \left(\Psi^+ \vec{\alpha}\, \Psi\right) \tag{14}$$

видим, что уравнение (13) можно интерпретировать как уравнение непрерывности

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t, \vec{x}) = \mathrm{div}\vec{j}(t, \vec{x}). \tag{15}$$

Для того, чтобы обосновать такую трактовку вычислим оператор скорости дираковской частицы

$$\widehat{\vec{v}} = \frac{\hbar}{i}\left[\widehat{H}, \vec{x}\right] = \frac{i}{\hbar}\left[\frac{\hbar c}{i}\vec{\alpha}\,\nabla + \beta mc^2, \vec{x}\right] = c\vec{\alpha}. \tag{16}$$

Собственные значения этой величины, которые, согласно свойству 2 матриц Дирака, равны $\pm c$, следует рассматривать как собственные значения мгновенной скорости. Более того, легко видеть, что

$$\left[\widehat{H}, \widehat{\vec{v}}\right] = c\left[\widehat{H}, \vec{\alpha}\right] \neq 0 \tag{17}$$

и, следовательно, невозможно одновременно измерить энергию и мгновенную скорость дираковской частицы. Далее увидим, что средняя скорость оказывается $|\langle\vec{v}\rangle\,| < c$. В результате движение дираковской частицы можно рассматривать как дрожание со скоростью света вокруг траектории по которой движется частица с групповой скоростью.

При этом ток выражается не через мгновенную скорость, а через среднее значение скорости

$$\vec{j} = q_0 c\Psi^+\widehat{\vec{\alpha}}\,\Psi = q_0\Psi^+\widehat{\vec{v}}\,\Psi = q_0\langle\vec{v}\rangle. \tag{18}$$

3 Ковариантная форма уравнения Дирака

Для перехода к ковариантной записи уравнения Дирака удобно перейти от матриц β и $\vec{\alpha}$ к так называемым γ-матрицам

$$\gamma^0 = \beta, \qquad \gamma^i = \beta\alpha_i \tag{19}$$

и уравнение Дирака приобретает вид явно релятивистски-ковариантного (если рассматривать γ^μ как контрвариантный вектор) условия

$$i\hbar\gamma^\mu\frac{\partial}{\partial x^\mu}\Psi(x) - mc\Psi(x) = 0. \tag{20}$$

Свойства γ-матриц тоже носят ковариантный характер

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}, \tag{21}$$

где $g^{\mu\nu}$ — метрический тензор пространства Минковского. Явный вид γ-матриц определяется с точностью до унитарного преобразования. Далее будем пользоваться представалением, в котором γ-матрицы следующий принимают вид в блочной форме

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}. \tag{22}$$

Ряд авторов используют другие представления.

Вводя обозначение для оператора 4-импульса

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial x^\mu} = p_\mu \tag{23}$$

уравнение (20) записывается как

$$(\not{p} - mc)\Psi(x) = 0, \qquad \text{где} \qquad \not{p} \equiv \gamma^\mu p_\mu. \tag{24}$$

Видим, что величину $\gamma^\mu p_\mu$ можно рассматривать как релятивистский скаляр.

В новых обозначениях уравнение непрерывности тоже имеет релятивистски-инвариантный вид

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} j^\mu = 0, \tag{25}$$

где

$$j^\mu = (c\rho, \vec{j}) = c\Psi^+\gamma^0\gamma^\mu\ \Psi = c\bar{\Psi}\gamma^\mu\ \Psi. \tag{26}$$

Здесь и далее используется обозначение $\bar{\Psi} = \Psi^+\gamma^0 = (\Psi_1^*, \Psi_2^*, -\Psi_3^*, -\Psi_4^*)$. Этот объект будем называть дираковски-сопряженным спинором.

4 Ковариантные структуры в теории Дирака

Из (25) следует, что величина $\bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi$ представляет контравариантный 4-вектор. Соответственно $\gamma_\mu = g_{\mu\nu}\gamma^\nu$ представляет ковариантный 4-вектор. Естествено задаться вопросом, какие еще ковариантные структуры существуют в теории Дирака? С этой целью следует рассмотреть всевозможные произведения γ-матриц. Оказывается, что в таких произведениях всего существует 16 линейно-независимых матриц

$$\begin{aligned} &\Gamma^S = 1, \qquad \Gamma^V_\mu = \gamma_\mu, \quad \Gamma^P = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \equiv \gamma_5 \equiv \gamma^5, \\ &\Gamma^T_{\mu\nu} = \frac{i}{2}\left[\gamma_\mu, \gamma_\nu\right] \equiv \sigma_{\mu\nu}, \qquad \Gamma^A_\mu = \gamma_5\gamma_\mu. \end{aligned} \tag{27}$$

Легко установить, что матрицы Γ обладают следующими свойствами

1. $(\Gamma^n)^2 = \pm 1$.
2. Для каждой матрицы $\Gamma^n \neq 1$ всегда существует такая матрица $\Gamma^m \neq 1$, что $\{\Gamma^n, \Gamma^m\} = 0$. Отсюда получаем
$$\mathrm{Tr}\ \Gamma^n = 0, \qquad \text{если} \qquad \Gamma^n \neq 1. \tag{28}$$
3. Непосредственной проверкой устанавливается также, что для любых заданных матриц $\Gamma^n \neq \Gamma^m$ всегда можно найти такую матрицу $\Gamma^r \neq 1$, что $\Gamma^n\Gamma^m = \Gamma^r$.

Теперь легко доказать линейну независимость матриц Γ. Действительно, положим

$$\sum_{n=1}^{16} c_n \Gamma^n = 0. \tag{29}$$

Умножив правую и левую части этого соотношения на $\Gamma^m \neq 1$ и воспользовавшись свойством 3 сразу получим, что $c_m = 0$ при $m \neq 1$. Далее вычислим след от (29) и сразу получим $c_1 = 0$.

Теперь рассмотрим следующие величины

$$\begin{aligned} &S = \bar{\Psi}(x)\Gamma^S\Psi(x), \quad V_\mu = \bar{\Psi}(x)\Gamma^V_\mu\Psi(x), \quad P = \bar{\Psi}(x)\Gamma^P\Psi(x) \\ &T_{\mu\nu} = \bar{\Psi}(x)\Gamma^T_{\mu\nu}\Psi(x), \qquad A_\mu = \bar{\Psi}(x)\Gamma^A_\mu\Psi(x). \end{aligned} \tag{30}$$

Оказывается, что при преобразованиях Лоренца они преобразуются как скаляр (S), вектор (V_μ), псевдоскаляр (P), тензор второго ранга ($T_{\mu\nu}$) и псевдовектор (A_μ). Этими величинами исчерпываются все возможные ковариантные структуры в теории Дирака.

5 Решения для свободной дираковской частицы

Сначала рассмотрим случай, когда частица находится в покое

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vec{x}}\Psi(t,\vec{x}) = 0, \tag{31}$$

т.е. волновая функция не зависит от пространственой координаты и уравнение Дирака сводится к

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t,\vec{x}=0) = \beta mc^2\Psi(t,\vec{x}=0). \tag{32}$$

Записывая

$$\Psi(t,\vec{x}=0) = e^{-(i\varepsilon mc^2/\hbar)t}w \tag{33}$$

находим, что уравнение (32) сводится к

$$\varepsilon w = \beta w. \tag{34}$$

Из свойств матриц Дирака сразу следует, что

$$\varepsilon = \pm 1. \tag{35}$$

При этом две собственные функции отвечают значениям квантового числа $\varepsilon = +1$

$$w^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{и} \qquad w^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{36}$$

и еще две отвечают значениям квантового числа $\varepsilon = -1$

$$w^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{и} \qquad w^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{37}$$

Решениям (36) можно придать смысл волновой функции частицы с энергией $E = \varepsilon mc^2 = mc^2$, а два решения интерпретировать как два спиновых состояния с проекциями спина $s = +1/2$ и $s = -1/2$, соответствено. Однако решения (36) формально соответствуют частице с отрицательной энергией $E = \varepsilon mc^2 = -mc^2$ и их интерпрепация встречает затруднение.

6 Нерелятивистское приближение для уравнения Дирака

Выше говорилось, что на что наличие решений с отрицательной энергией является серьезной проблемой в теории Дирака. Однако оказывается, что преодоление этой трудности и придание физической интерпретации решениям с отрицательной энергией приводит к настоящему триумфу теории. Это мы обсудим несколько позже. А сейчас займемся исследованием решений с положительной энергией и покажем что для них уравнение Дирака сводится в нерелятивистском пределе к уравнению Паули.

С этой целью введем взаимодействие дираковской частицы с электромагнтным полем. При этом будем исходить из принципа калибровочной инвариантности рассмотренный нами в Лекции 4. Взаимодействие должно быть введено так, чтобы уравнения остались неизменными при следующих преобразованиях волновой функции $\psi(\vec{x},t)$ и вектор-потенциала $A_\mu(\vec{x},t)$

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x},t) &\to \psi'(\vec{x},t) = \exp\left[i\frac{q_0}{\hbar c}f(\vec{x},t)\right], \\ A_\mu(\vec{x},t) &\to A_\mu(\vec{x},t) + \frac{\partial}{\partial x^\mu}(\vec{x},t)], \end{aligned} \tag{38}$$

где $f(\vec{x},t)$ — произвольная функция 4-координаты $x^\mu = (ct,\vec{x})$.

Это можно сделать, если заменить 4-импульс согласно

$$p^\mu \to p^\mu - \frac{q_0}{c}A^\mu, \qquad A^\mu = (c\Phi, \vec{A}). \tag{39}$$

Тогда свободное уравнение Дирака преобразуется к

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[c\vec{\alpha}\left(\vec{p} - \frac{q_0}{c}\vec{A}\right) + \beta mc^2 + q_0\Phi\right]\psi. \tag{40}$$

Таким образом гамильтониан принимает вид

$$\begin{aligned} &\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{H}_{\text{вз.}}, \\ &\widehat{H}_0 = c\vec{\alpha}\vec{p} + \beta mc^2, \\ &\widehat{H}_{\text{вз.}} = -q_0\vec{\alpha}\vec{A} + q_0\Phi = -\frac{q_0}{c}\,\widehat{\vec{v}}\vec{A} + q_0\Phi. \end{aligned} \tag{41}$$

Для дальнейшего анализа удобно записать волновую функцию $\psi(\vec{x},t)$ через пару двухкомпонентных спиноров

$$\psi = \begin{pmatrix} \widetilde{\phi} \\ \widetilde{\chi} \end{pmatrix} \tag{42}$$

Тогда уравнение Дирака во внешнем электромагнитном поле примет вид системы двух уравнений

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{\phi} &= c\vec{\sigma}\vec{\pi}\widetilde{\chi} + q_0\Phi\widetilde{\phi} + mc^2\widetilde{\phi}, \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{\chi} &= c\vec{\sigma}\vec{\pi}\widetilde{\phi} + q_0\Phi\widetilde{\chi} - mc^2\widetilde{\chi}, \end{aligned} \tag{43}$$

где $\vec{\pi} \equiv \vec{p} - \frac{q_0}{c}\vec{A}$.

Аналогично тому, как это было в случае уравнения Клейна-Гордона-Фока, сделаем преобразование

$$\begin{pmatrix} \widetilde{\phi} \\ \widetilde{\chi} \end{pmatrix} = \exp\left(-i\frac{mc^2}{\hbar}t\right)\begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}. \tag{44}$$

Тогда система уравнений (43) сведется к системе

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi &= c\vec{\sigma}\vec{\pi}\chi + q_0\Phi\phi, \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi &= c\vec{\sigma}\vec{\pi}\phi + q_0\Phi\chi - 2mc^2\chi. \end{aligned} \tag{45}$$

Считая, что кинетическая энергия и энергия взаимодействия малы по сравнению с mc^2, второе из этих уравнений дает следующую связь между двумя спинорами ϕ и χ

$$\chi = \frac{\vec{\sigma}\vec{\pi}}{2mc}\phi \sim \mathcal{O}\left(\frac{v}{c}\right). \tag{46}$$

Подставляя (46) в первое уравнение системы (45) получим уравнение для ϕ

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi = \left[\frac{(\vec{\sigma}\vec{\pi})^2}{2m} + q_0\Phi\right]\phi. \tag{47}$$

Используя свойства матриц Паули

$$\begin{aligned} &(\vec{\sigma}\vec{\pi})^2 = \vec{\pi}^2 + i\sigma \cdot [\vec{\pi} \times \vec{\pi}]. \\ &[\vec{\pi} \times \vec{\pi}] = -\frac{q_0}{c}\left([\vec{p} \times \vec{A}] + [\vec{A} \times \vec{p}]\right) = -\frac{\hbar}{i}\frac{q_0}{c}\mathrm{rot}\vec{A} = -\frac{\hbar}{i}\frac{q_0}{c}\vec{B}. \end{aligned} \tag{48}$$

В результате получаем, что уравнение (47) сводится к уравнению Паули

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi = \left[\frac{(\vec{p} - \frac{q_0}{c}\vec{A})^2}{2m} - \frac{\hbar}{i}\frac{q_0}{c}\vec{B} + q_0\Phi\right]\phi. \tag{49}$$