Л Е К Ц И Я   15

ОСНОВЫ КВАЗИРЕЛЯТИВИСТСКОЙ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ
Продолжение

УРАВНЕНИЕ КЛЕЙНА-ГОРДОНА

Делая в выражении $E^2 = \mathbf{p}^2c^2 + \mu^2c^4$ подстановки

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \qquad \mathbf{p} \to -i\hbar\boldsymbol{\nabla},$$

получим

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = (-c^2\hbar^2\boldsymbol{\nabla}^2 + \mu^2c^4)\psi = 0$$

или

$$\boldsymbol{\nabla}^2\psi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \frac{\mu^2c^2}{\hbar^2}\psi = 0. \qquad (*)$$

Вводя инвариантный оператор Даламбера

$$\Delta = \frac{\partial}{\partial x_\nu}\frac{\partial}{\partial x^\nu} \equiv \nabla^\nu\nabla_\nu = g^{\nu\lambda}\frac{\partial}{\partial x^\nu}\frac{\partial}{\partial x^\lambda} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2,$$

запишем уравнение в явно ковариантной форме

$$\Delta\psi + (\frac{\mu c}{\hbar})^2\psi = 0 \qquad (**)$$

К нему можно прийти и из ковариантного соотношения

$$p^2 = p^\nu p_\nu = \mu^2c^2,$$

делая в нем подстановки

$$p^\nu \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_\nu} \equiv -i\hbar\nabla^\nu.$$

Так или иначе, имеем релятивистский аналог уравнения Шредингера, которое называется *уравнение Клейна-Гордона*.

Умножая $(*)$ слева на ψ^*, а сопряженное уравнение слева на ψ и производя вычитание, после элементарных выкладок получим уравнение непрерывности

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}\,\mathbf{j} = 0,$$

выражающее некий закон сохранения, в котором

$$\rho = \frac{i\hbar}{2\mu c^2}\left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)$$

и

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2\mu i}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*).$$

Можно поступить иначе: умножить (∗∗) на ψ^*, а сопряженное уравнение на ψ и вычесть. Тогда получим уравнение непрерывности в ковариантной форме

$$\nabla^\mu j_\mu = 0,$$

где

$$j_\mu = \psi^*\nabla_\mu\psi - \psi\nabla_\mu\psi^*.$$

Расписывая по компонентам, получим те же результаты.

Вектор $\mathbf{j}$ получился абсолютно таким же, как в нерелятивистской квантовой механике, а там мы его отождествили с вектором плотности потока вероятности. Но там плотность вероятности была

$$\rho = |\psi|^2 \equiv \psi^*\psi,$$

а здесь для нее получилось другое выражение. Казалось бы, и здесь новое ρ можно интерпретировать как плотность вероятности. Но такая интерпретация *не проходит*. Уравнение Клейна-Гордона - второго порядка по времени, а потому для него необходимо задать 2 начальных условия - для ψ и $\frac{\partial\psi}{\partial t}$. И их всегда можно подобрать так, что будет $\rho<0$. Мало того, если при $t=0$ $\rho>0$, то по истечении времени может быть как $\rho>0$, так и $\rho<0$, т.е. плотность вероятности будет индефинитной, тогда как она должна быть всегда по самому смыслу быть положительно определенной.

Видим, что трудность проистекает из-за того, что в уравнении - вторая производная по времени. Попытаемся получить релятивистское уравнение первого порядка по времени. Но в СТО время и координаты равноправны, поэтому уравнение должно быть первого порядка и по координатам. Общий вид такого уравнения

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i}\left(\alpha_1\frac{\partial\psi}{\partial x^1} + \alpha_2\frac{\partial\psi}{\partial x^2} + \alpha_3\frac{\partial\psi}{\partial x^3}\right) + \beta\mu c^2\psi \equiv \hat{H}\psi,$$

где $i\hbar$ в самом начале поставлено просто для удобства, для сравнения с обычным уравнением. Здесь α_1, α_2, α_3 и β - некоторые неизвестные коэффициенты. Ясно, что ψ не может быть обычной скалярной функцией, ибо при обычном трехмерном вращении левая часть не изменится, а правая преобразуется как вектор. Поэтому считаем ψ многокомпонентной (с дополнительными внутренними степенями свободы):

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r},t) \\ \psi_2(\mathbf{r},t) \\ \cdots\cdots \\ \psi_N(\mathbf{r},t) \end{pmatrix}.$$

Поэтому на самом деле нужно писать не ψ, а $\psi_\sigma(\mathbf{r},t)$, и отсюда уже почти ясно, что α_j и β должны быть не обычными числами, а матрицами.

Каждый компонент ψ_σ должен подчиняться уравнению Клейна-Гордона

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi_\sigma}{\partial t^2} = (-c^2\hbar^2\nabla^2 + \mu^2 c^4)\psi_\sigma ,$$

так как оно выражает лишь релятивистское соотношение между **p** и *E*. Это сейчас позволит нам найти коэффициенты α_j, β. Для этого берем уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

и действуем на обе его части оператором $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \hat{H}$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}) = \hat{H}(\hat{H}\psi).$$

Подставляя явное выражение $\hat{H}$ и производя аккуратно (с учетом возможной некоммутативности α_j и β) перемножение, получим

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 (\frac{\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i}{2}) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^i \partial x^j} + \frac{\hbar\mu}{i} c^3(\alpha_j\beta + \beta\alpha_j)\frac{\partial \psi}{\partial x^j} + \beta^2\mu^2 c^4 \psi$$

(по двойным индексам - суммирование от 1 до 3). Чтобы это уравнение совпало с УКГ, необходимо потребовать

$$\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_I = 2\delta_{ij}, \quad \alpha_i\beta + \beta\alpha_I = 0, \quad \beta^2 = 1. \qquad (***)$$

Отсюда уже абсолютно ясно, что α_j, β - матрицы, а потому $\hat{H}$ - матричный (и дифференциальный) оператор. Поскольку $\hat{H}$ должен быть эрмитовым оператором, то α_j, β-квадратные матрицы, причем порядка $N\times N$, где N - число компонентов у ψ_σ. Система уравнений (***) неразрешима при слишком малых N(=1,2,3). Минимальное N, при котором система перестает быть переопределенной, есть N=4 (вообще можно доказать, что N должно быть четным, мало того, оно должно быть квадратом, так что следующее N есть N=16). Одно из возможных решений таково:

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix},$$

где σ_i - матрицы Паули:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Существуют и другие решения, но они не дают новой физики, ибо связаны с предыдущим преобразованием унитарной эквивалентности.

Итак, получаем *уравнение Дирака*

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i} \alpha_j \frac{\partial \psi}{\partial x^j} + \beta\mu c^2 \psi,$$

где *матрицы Дирака* подчиняются соотношениям (***), и один из наборов выписан явно выше. Функция ψ на самом деле есть 4-компонентный столбец

$$\psi(\mathbf{r},t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r},t) \\ \psi_2(\mathbf{r},t) \\ \psi_3(\mathbf{r},t) \\ \psi_4(\mathbf{r},t) \end{pmatrix},$$

и в более подробной форме записи уравнение Дирака выглядит так:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_\sigma}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i}\alpha_j{}^{\sigma\delta}\frac{\partial\psi_\sigma}{\partial x^j} + \beta\mu c^2\psi_\sigma$$

На самом деле это система четырех уравнений для четырех функций ψ_σ.

Уравнение Дирака можно записать гораздо более симметрично, если умножить обе его части слева на β и ввести новые матрицы 4×4

$$\gamma^0 = \beta, \quad \gamma^j = \beta\alpha_j = \gamma^0\alpha_j,$$

удовлетворяющие антикоммутационным соотношениям

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}.$$

Тогда получим

$$i\gamma^\nu\frac{\partial\psi}{\partial x^\nu} - \left(\frac{\mu c}{\hbar}\right)\psi = 0.$$

Именно в этой форме записи удобнее всего исследовать свойство релятивистской инвариантности.

Введем сопряженную функцию

$$\psi^+ = (\psi_1{}^*, \psi_2{}^*, \psi_3{}^*, \psi_4{}^*),$$

которая подчиняется уравнению, сопряженному дираковскому:

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^+}{\partial t} = -\frac{\hbar c}{i}\frac{\partial\psi^+}{\partial x^j}\alpha_j + \beta\mu c^2\psi^+.$$

Умножая уравнение Дирака слева на ψ^+, а сопряженное справа на ψ, найдем

$$i\hbar\psi^+\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x^j}\alpha_j\psi^+ + \beta\mu c^2\psi^+\psi.$$

и

$$-i\hbar\psi\frac{\partial\psi^+}{\partial t} = -\frac{\hbar c}{i}\frac{\partial\psi^+}{\partial x^j}\alpha_j\psi + \beta\mu c^2\psi^+\psi$$

Производим вычитание

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^+\psi) = \frac{\hbar c}{i}\frac{\partial}{\partial x^j}(\psi^+\alpha_j\psi).$$

В итоге получаем уравнение непрерывности

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}\mathbf{j} = 0,$$

где

$$\rho = \psi^{+}\psi, \quad \mathbf{j} = c\psi^{+}\boldsymbol{\alpha}\psi \ \ [\boldsymbol{\alpha} \equiv (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)].$$

Величина ρ положительно определена:

$$\rho = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2$$

и может быть интерпретирована как *плотность вероятности*, чего нельзя было сделать в случае уравнения Клейна-Гордона. Она очень похожа на обычную плотность вероятности, только содержит 4 слагаемых. Но вектор **j**, интерпретируемый как плотность потока вероятности, теперь существенно изменился; в частности, он не содержит пространственных координат.

Будем искать решение уравнения Дирака в виде

$$\psi_{E\mathbf{p}}(\mathbf{r},t) = w(E,\mathbf{p})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr})}; \; w \equiv \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix}, v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} w_3 \\ w_4 \end{pmatrix}.$$

Подставляя все это в уравнение Дирака и учитывая явный вид матриц α_j и β, получим алгебраическую систему формально двух, на самом деле четырех уравнений

$$Eu = c(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})v + \mu c^2 u$$

$$Ev = c(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})u - \mu c^2 v,$$

где

$$\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}, \quad \boldsymbol{\sigma}\mathbf{p} = \sigma_1 p^1 + \sigma_2 p^2 + \sigma_3 p^3 = \sigma_j p^j.$$

Условие нетривиальной разрешимости дает

$$\begin{vmatrix} E - \mu c^2 & -c(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}) \\ -c(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}) & E + \mu c^2 \end{vmatrix} = 0$$

откуда

$$E^2 - \mu^2 c^4 - c^2(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})^2 = 0.$$

Раскрываем

$$(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})^2 = (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}) = \sigma_j p^j \sigma_k p^k = (\sigma_j\sigma_k)(p_j p_k).$$

Учитывая, что

$$\sigma_j\sigma_k = 0 \ (j \neq k), \ (\sigma_j)^2 = \mathrm{I},$$

получим

$$(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})^2 = \mathbf{p}^2,$$

и условие разрешимости запишется как

$$E^2 - \mu^2 c^4 - c^2\mathbf{p}^2 = 0.$$

Таким образом, нетривиальные решения существуют лишь при

$$E = \pm\sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + \mu^2c^4} \equiv \pm\varepsilon_p,$$

а это есть релятивистское соотношение между энергией и импульсом (но появились оба знака!).

Так как det=0, то второе уравнение будет следствием первого, и его можно не рассматривать, но лучше бывает оставить второе, а выкинуть первое. При $E=\varepsilon_p$ задает u произвольно, тогда из второго

$$v = \frac{c(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})}{\varepsilon_p + \mu c^2}u.$$

Но само u содержит две линейно независимые функции:

$$u(\mathbf{p}) = u_{01}(\mathbf{p}) + u_{02}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix}\varphi_1\\0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\\varphi_2\end{pmatrix}.$$

Поэтому находим при $E=\varepsilon_p>0$:

$$w_{+\lambda} = \begin{pmatrix} u_{0\lambda}(\mathbf{p}) \\ c\dfrac{(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})}{\varepsilon_p + \mu c^2}u_{0\lambda}(\mathbf{p})\end{pmatrix}, \quad (\lambda = 1,2).$$

Вторую пару решений получим при $E = -\varepsilon_p < 0$. Теперь будем считать заданным

$$v(\mathbf{p}) = v_{01}(\mathbf{p}) = v_{02}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix}\varphi_3\\0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\\varphi_4\end{pmatrix},$$

и из первого уравнения системы получим

$$u = -\frac{c(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})}{\varepsilon_p + \mu c^2}v.$$

Поэтому находим при $E = -\varepsilon_p < 0$:

$$w_{-\lambda}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} -c\dfrac{(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})}{\varepsilon_p + \mu c^2}v_{0\lambda} \\ v_{0\lambda}\end{pmatrix}.$$

Таким образом, внутренними переменными, значения которых характеризуют разные решения, являются знак энергии (+ и –), а также величина λ. Ее значения $\lambda=1, 2$ нумеруют решения внутри верхней пары u и нижней пары v компонентов полной волновой функции.