

ЛЕКЦИЯ 13

ОСНОВИ НА РЕЛАТИВИСТИЧНАТА КВАНТОВА МЕХАНИКА

Уравнението на Шрьодингер $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r, t) \right) \Psi$ не

удовлетворява **принципа на относителността**, съгласно който всички закони на физиката са еднакви във всички инерциални отправни системи. В аналитична форма той гласи: при преход от една инерциална отправна система в друга, при което координатите се преобразуват по трансформациите на Лоренц, величините в уравнение, изразяващо физичен закон, трябва да се преобразуват така, че съотношението между тях в новата инерциална отправна система да се изразява с уравнение, съвпадащо по форма с първоначалното. В уравнението на Шрьодингер координатите и времето, както и производните по тях, фигурират неравноправно и то е в сила само за скорости на частиците, чиито големина са малки в сравнение със скоростта на светлината във вакуум c . Затова уравнението на Шрьодингер не удовлетворява принципа на относителността.

В релативистичните вълнови уравнения координатите и времето трябва да фигурират равноправно.

1. Уравнение на Клайн – Гордън – Фок

От теорията на относителността е известно, че зависимостта на енергията от импулса и масата в покой за свободна релативистична частица се задава чрез съотношението

$$E^2 = c^2(\vec{p}^2 + m_0^2 c^2). \quad (13,1)$$

Тази формула може да се запише в друг вид, чрез използване на понятието четиримерен импулс [12] $p = (p^0, \vec{p})$, където $p^0 = \frac{E}{c}$. Имайки предвид, че $p^2 = (p^0)^2 - \vec{p}^2$, съотношението (13,1) се записва във вида

$$p^2 = m_0^2 c^2, \quad (13,2)$$

където

$$p = \left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right). \quad (13,3)$$

Известно е, че на импулса $\vec{p}$ на свободна частица се съпоставя оператора $\hat{p} \equiv -i\hbar \nabla$. По аналогия, на четиримерния импулс (13,3) съпоставяме оператор на четиримерния импулс

$$\hat{p} = (\hat{p}^0, \hat{\vec{p}}), \quad (13,4)$$

където

$$\hat{p}^o = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x^o}, \quad x^o = ct. \quad (13,5)$$

Съгласно основните положения на квантовата механика (Постулат 2), уравнението (13,2) преминава в операторно равенство

$$(\hat{p}^o)^2 - \hat{\vec{p}}^2 = m_o^2 c^2. \quad (13,6)$$

Прилагайки това операторно равенство към вълнова функция Ψ , описваща свободна релативистична частица, получаваме

$$-\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} + \hbar^2 \Delta \Psi = m_o^2 c^2 \Psi. \quad (13,7)$$

Това уравнение е известно като **уравнение на Клайн – Гордън – Фок** (1926 г.).

То може да бъде записано във вид на класическо вълново уравнение

посредством оператора на Даламбер $\mathfrak{g} = \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$:

$$\left(m - \frac{m_o^2 c^2}{\hbar^2} \right) \Psi = 0. \quad (13,8)$$

Ще отбележим някои характерни отличия на уравнението на Клайн – Гордън – Фок в сравнение с уравнението на Шрьодингер:

1. Уравнението (13,8) се явява релативистично инвариантно (не се променя при преход в друга инерциална отправна система), ако Ψ е четиримерен скалар, т.е. величина неизменяща се при преобразованията на Лоренц;
2. Уравнението на Клайн – Гордън – Фок е от II ред по времето и следователно, за решаването му е необходимо познаването на Ψ и $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ в началния момент време, т.е. необходими са два пъти повече сведения, отколкото за решаването на уравнението на Шрьодингер. Това отразява факта, че с уравнението на Клайн – Гордън – Фок се описват едновременно частици и античастици;
3. Чрез непосредствено заместване може да се провери, че плоските вълни

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \mathbf{r} - Et)} \quad (13,9)$$

са решения на уравнението на Клайн – Гордон – Фок и при двата знака на енергията $E = \pm c \sqrt{\vec{p}^2 + m_o^2 c^2}$, т.е. съществуват решения с отрицателна енергия. Както ще видим по-надолу, те описват античастици.

От уравнението на Клайн – Гордон – Фок (13,7) ще получим квантовомеханичното уравнение на непрекъснатостта, аналогично на нерелативистичния

случай. За тази цел умножаваме (13,7) отляво с Ψ^* и изваждаме от полученото уравнение комплексно спрегнатото му уравнение. В резултат получаваме

$$\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^* = \frac{1}{c^2} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial t^2} \right). \quad (13,10)$$

Като вземем предвид известните равенства

$$\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^* = \text{div} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*), \quad (13,11)$$

$$\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right), \quad (13,12)$$

и въведем означенията

$$\rho(r, t) = \frac{ie\hbar}{2mc^2} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right), \quad (13,13)$$

$$\vec{j}(r, t) = \frac{e\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*), \quad (13,14)$$

където e е зарядът на частицата, получаваме уравнението на непрекъснатостта

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0. \quad (13,15)$$

Както отбелязахме по-горе, уравнението на Клайн – Гордън – Фок се удовлетворява от плоските вълни (13,9) и при двата знака на енергията

$$E = \pm E_{\vec{p}}, \quad (13,16)$$

където

$$E_{\vec{p}} = \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}. \quad (13,17)$$

Следователно, съществуват два типа решения

$$\Psi_{\pm}(r, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} \mp E_{\vec{p}} t)} = e^{\pm \frac{i}{\hbar}(\pm \vec{p} \cdot \vec{r} - E_{\vec{p}} t)}. \quad (13,18)$$

Решението с $E > 0$ описва движение на положителни заряди с импулс $\vec{p}$,

$\rho = \frac{eE_{\vec{p}}}{mc^2} > 0$. Това решение описва движение на частици, а решението с $E < 0$

описва движение на отрицателни заряди с импулс $-\vec{p}$, $\rho = -\frac{eE_{\vec{p}}}{mc^2} < 0$ – описва античастици.

Ако Ψ описва частици, то Ψ^* описва античастици. Следователно, комплексното спрягане описва прехода частица – античастица.

Едно произволно решение на уравнението на Клайн – Гордън – Фок може да се запише така:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int \left[u_{\vec{p}}^+ e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \mathbf{r} - E_{\vec{p}} t)} + v_{\vec{p}}^- e^{\frac{i}{\hbar}(-\vec{p} \cdot \mathbf{r} - E_{\vec{p}} t)} \right] \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \quad (13,19)$$

където $u_{\vec{p}}^+$ и $v_{\vec{p}}^-$ са произволни амплитуди, функции на $\vec{p}$.

Уравнението на Клайн – Гордън – Фок е неприложимо за описание на релативистки електрон, понеже вълновата функция в него се състои от една компонента, а е необходимо да се състои от две (вж. Лекция 12). Тази функция трябва да описва двете различни спинови състояния на електрона, отговарящи на двете възможни проекции на неговия спин $\left(\frac{\hbar}{2} \text{ и } -\frac{\hbar}{2}\right)$. Изследванията показват, че уравнението на Клайн – Гордън – Фок е приложимо за описание на безспинови частици (така наречените скаларни мезони).

Да извършим нерелативистичен преход в уравнението на Клайн – Гордън – Фок (13,7) с помощта на унитарната трансформация

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}, t) e^{-i\frac{m_0 c^2}{\hbar} t}. \quad (13,20)$$

Използваме, че

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \frac{\partial \varphi}{\partial t} e^{-i\frac{m_0 c^2}{\hbar} t} - i\frac{m_0 c^2}{\hbar} \varphi e^{-i\frac{m_0 c^2}{\hbar} t}; \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} &= \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} e^{-i\frac{m_0 c^2}{\hbar} t} - 2i\frac{m_0 c^2}{\hbar} \frac{\partial \varphi}{\partial t} e^{-i\frac{m_0 c^2}{\hbar} t} - \frac{m_0^2 c^4}{\hbar^2} \varphi e^{-i\frac{m_0 c^2}{\hbar} t} \approx \\ &\approx -2i\frac{m_0 c^2}{\hbar} \frac{\partial \varphi}{\partial t} e^{-i\frac{m_0 c^2}{\hbar} t} - \frac{m_0^2 c^4}{\hbar^2} \varphi e^{-i\frac{m_0 c^2}{\hbar} t}; \end{aligned} \quad (13,21)$$

$$\Delta \Psi = e^{-i\frac{m_0 c^2}{\hbar} t} \Delta \varphi. \quad (13,22)$$

Замествайки (13,20), (13,21) и (13,22) в (13,7), получаваме уравнението на Шрьодингер за свободна частица

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \varphi(\mathbf{r}, t).$$

2. Уравнение на Дирак

Релативистично уравнение за описание на свойствата на електрона е намерено от Дирак (1928 г.). Той е направил така наречената линеаризация на уравнението на Клайн – Гордън – Фок, което е диференциално уравнение от II ред. Дирак предполага, че свободният електрон се описва от линейно диференциално уравнение от I ред, в което координатите и времето фигурират по един и същи начин, за да бъде то релативистично инвариантно:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\beta'_x \frac{\partial}{\partial x} + \beta'_y \frac{\partial}{\partial y} + \beta'_z \frac{\partial}{\partial z} + \beta_o \right) \Psi . \quad (13,23)$$

Ако в (13,23), вместо производните по координатите, се въведат операторите на компонентите на импулса $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$ и $\hat{p}_z$, то може да бъде записано във вида

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{\beta}_x \hat{p}_x + \hat{\beta}_y \hat{p}_y + \hat{\beta}_z \hat{p}_z + \hat{\beta}_o) \Psi , \quad (13,24)$$

където операторите $\hat{\beta}_x$, $\hat{\beta}_y$, $\hat{\beta}_z$ и $\hat{\beta}_o$ не съдържат координатите. Ако въведем оператора

$$\hat{H} = \hat{\beta}_x \hat{p}_x + \hat{\beta}_y \hat{p}_y + \hat{\beta}_z \hat{p}_z + \hat{\beta}_o , \quad (13,25)$$

който може да се разглежда като оператор на Хамилтон на частицата, уравнението (13,24) се записва във вида

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi , \quad (13,26)$$

който съвпада с вида на уравнението на Шрьодингер.

Ако предположим, че операторът $\hat{H}$ (13,25) действително представлява хамилтониана на частицата, то между $\hat{H}$ и оператора на импулса трябва да съществува същата връзка, както между енергията и импулса на свободна частица в теорията на относителността (вж. (13,1)), т.е.

$$\hat{H}^2 = c^2 (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + m_o^2 c^4 . \quad (13,27)$$

Повдигайки двете страни на (13,25) в квадрат, получаваме

$$\begin{aligned} \hat{H}^2 = & \hat{\beta}_x^2 \hat{p}_x^2 + \hat{\beta}_y^2 \hat{p}_y^2 + \hat{\beta}_z^2 \hat{p}_z^2 + (\hat{\beta}_x \hat{\beta}_y + \hat{\beta}_y \hat{\beta}_x) \hat{p}_x \hat{p}_y + (\hat{\beta}_x \hat{\beta}_z + \hat{\beta}_z \hat{\beta}_x) \hat{p}_x \hat{p}_z + \\ & + (\hat{\beta}_y \hat{\beta}_z + \hat{\beta}_z \hat{\beta}_y) \hat{p}_y \hat{p}_z + (\hat{\beta}_x \hat{\beta}_o + \hat{\beta}_o \hat{\beta}_x) \hat{p}_x + (\hat{\beta}_y \hat{\beta}_o + \hat{\beta}_o \hat{\beta}_y) \hat{p}_y + \\ & + (\hat{\beta}_z \hat{\beta}_o + \hat{\beta}_o \hat{\beta}_z) \hat{p}_z + \hat{\beta}_o^2 . \end{aligned} \quad (13,28)$$

За да съвпадат (13,27) и (13,28), необходимо е да са изпълнени съотношенията :

$$\hat{\beta}_x^2 = \hat{\beta}_y^2 = \hat{\beta}_z^2 = c^2 ; \quad (13,29)$$

$$\hat{\beta}_o^2 = m_o^2 c^4 ; \quad (13,30)$$

$$\hat{\beta}_i \hat{\beta}_k + \hat{\beta}_k \hat{\beta}_i = 0 , \quad i \neq k ; \quad (13,31)$$

$$\hat{\beta}_i \hat{\beta}_o + \hat{\beta}_o \hat{\beta}_i = 0 , \quad (13,32)$$

където, вместо индексите x, y, z , са въведени индексите i и k , вземащи стойности 1, 2, 3 , съответстващи на x, y, z .

Вместо операторите $\hat{\beta}_x, \hat{\beta}_y, \hat{\beta}_z$ и $\hat{\beta}_o$, въвеждаме операторите $\hat{\alpha}_x, \hat{\alpha}_y, \hat{\alpha}_z$ и $\hat{\beta}$:

$$\hat{\beta}_x = c \hat{\alpha}_x, \hat{\beta}_y = c \hat{\alpha}_y, \hat{\beta}_z = c \hat{\alpha}_z, \hat{\beta}_o = m_o c^2 \hat{\beta} . \quad (13,33)$$

Очевидно, за $\hat{\alpha}_x, \hat{\alpha}_y, \hat{\alpha}_z$ и $\hat{\beta}$ са изпълнени съотношенията

$$\hat{\alpha}_x^2 = \hat{\alpha}_y^2 = \hat{\alpha}_z^2 = \hat{I} , \quad \hat{\beta}^2 = \hat{I} ; \quad (13,34)$$

$$\hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_k + \hat{\alpha}_k \hat{\alpha}_i = 0 , \quad i \neq k ; \quad (13,35)$$

$$\hat{\alpha}_i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_i = 0 , \quad (13,36)$$

където $\hat{I}$ е единичният оператор.

С помощта на въведените оператори, уравнението на Дирак за свободна частица (13,24) може да бъде записано във вида

$$i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = [c(\hat{\alpha}_x \hat{p}_x + \hat{\alpha}_y \hat{p}_y + \hat{\alpha}_z \hat{p}_z) + m_o c^2 \hat{\beta}] \Psi . \quad (13,37)$$

Ако въведем векторния оператор

$$\hat{\vec{\alpha}} = \hat{\alpha}_x \vec{i} + \hat{\alpha}_y \vec{j} + \hat{\alpha}_z \vec{k} , \quad (13,38)$$

уравнението на Дирак приема вида

$$i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi , \quad (13,39)$$

където

$$\hat{H} = c \hat{\vec{\alpha}} \cdot \hat{\vec{p}} + m_0 c^2 \hat{\beta} . \quad (13,40)$$

Операторите $\hat{\alpha}_x, \hat{\alpha}_y, \hat{\alpha}_z$ се изразяват чрез матриците на Паули $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ (вж. Лекция 12):

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_x &= \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_x \\ \hat{\sigma}_x & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\alpha}_y = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_y \\ \hat{\sigma}_y & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{\alpha}_z &= \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_z \\ \hat{\sigma}_z & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 \\ 0 & -\hat{I} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (13,41)$$

където $\hat{I}$ е единичната матрица.

Не е трудно да се провери, че матриците $\hat{\alpha}_x, \hat{\alpha}_y, \hat{\alpha}_z$ и $\hat{\beta}$ са ермитови. Поради това, за тях можем да напишем

$$\hat{\alpha}_x^+ = \hat{\alpha}_x, \quad \hat{\alpha}_y^+ = \hat{\alpha}_y, \quad \hat{\alpha}_z^+ = \hat{\alpha}_z, \quad \hat{\beta}^+ = \hat{\beta} . \quad (13,42)$$

Понеже $\hat{\alpha}_x, \hat{\alpha}_y, \hat{\alpha}_z$ и $\hat{\beta}$ са четириредни матрици, вълновата функция Ψ трябва да бъде четирикомпонентна матрица-стълб

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}, \quad (13,43)$$

която се нарича **биспинор на Дирак**.

Уравнението на Дирак (13,39) представлява система от 4 линейни уравнения относно четирите компоненти на вълновата функция :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} = c(\hat{p}_x - i\hat{p}_y)\Psi_4 + c\hat{p}_z\Psi_3 + m_0 c^2 \Psi_1, \quad (13,44a)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = c(\hat{p}_x + i\hat{p}_y)\Psi_3 - c\hat{p}_z\Psi_4 + m_0 c^2 \Psi_2, \quad (13,44б)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_3}{\partial t} = c(\hat{p}_x - i\hat{p}_y)\Psi_2 + c\hat{p}_z\Psi_1 - m_0 c^2 \Psi_3, \quad (13,44в)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_4}{\partial t} = c(\hat{p}_x + i\hat{p}_y)\Psi_1 - c\hat{p}_z\Psi_2 - m_0 c^2 \Psi_4. \quad (13,44г)$$

Ще получим уравнението на непрекъснатостта от уравнението на Дирак

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (-i\hbar c \hat{\alpha} \cdot \nabla + m_0 c^2 \hat{\beta}) \Psi . \quad (13,45)$$

Спрегнатото уравнение на (13,45) има вида

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} = i\hbar c (\nabla \Psi^+) \cdot \hat{\alpha}^+ + m_0 c^2 \Psi^+ \hat{\beta}^+ , \quad (13,46)$$

където Ψ^+ е матрица-ред с 4 елемента:

$$\Psi^+ = (\Psi_1^* \quad \Psi_2^* \quad \Psi_3^* \quad \Psi_4^*) . \quad (13,47)$$

Понеже операторите $\hat{\alpha}$ и $\hat{\beta}$ са ермитови, $\hat{\alpha}^+ = \hat{\alpha}$, $\hat{\beta}^+ = \hat{\beta}$ и (13,46) има вида

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} = i\hbar c (\nabla \Psi^+) \cdot \hat{\alpha} + m_0 c^2 \Psi^+ \hat{\beta} . \quad (13,48)$$

За да получим уравнението на непрекъснатостта, умножаваме уравнение (13,45) отляво с Ψ^+ , а уравнение (13,48) – отдясно с Ψ и изваждаме от първото уравнение второто. Така получаваме

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^+ \Psi) = -i\hbar c [\Psi^+ \hat{\alpha} \cdot \nabla \Psi + (\nabla \Psi^+ \cdot \hat{\alpha}) \Psi] . \quad (13,49)$$

Изразът в средните скоби на (13,49) може лесно да се преобразува с помощта на формулата [10,17] :

$$\text{div}(uU) = u \text{div} U + U \cdot \text{grad} u , \quad (13,50)$$

където u е скаларно поле, а U – векторно поле. Така имаме

$$\Psi^+ \hat{\alpha} \cdot \nabla \Psi + (\nabla \Psi^+ \cdot \hat{\alpha}) \Psi = \Psi^+ \text{div}(\hat{\alpha} \Psi) + \text{grad} \Psi^+ \cdot (\hat{\alpha} \Psi) = \text{div}(\Psi^+ \hat{\alpha} \Psi) , \quad (13,51)$$

където е използвано, че $\text{div} \hat{\alpha} = 0$. Заместваме (13,51) в (13,49) и получаваме

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Psi^+ \Psi) + \text{div}(c \Psi^+ \hat{\alpha} \Psi) = 0 . \quad (13,52)$$

Следователно, изразите за плътността на вероятността и плътността на потока на вероятността са, съответно:

$$\rho = \Psi^+ \Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* & \Psi_3^* & \Psi_4^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + |\Psi_3|^2 + |\Psi_4|^2. \quad (13,53)$$

$$\vec{j} = c \Psi^+ \hat{\alpha} \Psi. \quad (13,54)$$

Плътноста на вероятността за уравнението на Дирак, определена от израза (13,53), е неотрицателна величина, за разлика от плътността на вероятността за уравнението на Клайн – Гордън – Фок, определена от (13,13).

Най-прост пример за решаване на уравнението на Дирак е случая, когато то описва свободна частица. Решението в този случай се представя във вида

$$\Psi = \Psi_o e^{-i \frac{E}{\hbar} t}, \quad (13,55)$$

където Ψ_o не зависи от времето. Замествайки Ψ от (13,55) в (13,45), получаваме уравнението за независещата от времето вълнова функция Ψ_o :

$$E \Psi_o = (c \hat{\alpha} \cdot \hat{p} + m_o c^2 \hat{\beta}) \Psi_o. \quad (13,56)$$

Тази вълнова функция търсим във вид на плоска вълна

$$\Psi_o = u e^{i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}}, \quad (13,57)$$

където u е матрица-стълб

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w \\ w' \end{pmatrix}, \quad (13,58)$$

където w и w' от своя страна са матрици-стълбове с по два елемента:

$$w = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}, \quad w' = \begin{pmatrix} u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}. \quad (13,59)$$

Като заместим (13,57) в (13,56) и разделим на $e^{i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}}$, получаваме уравнението

$$E u = (c \hat{\alpha} \cdot \hat{p} + m_o c^2 \hat{\beta}) u, \quad (13,60)$$

което е еквивалентно на системата уравнения:

$$E w = c \hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}} w' + m_0 c^2 w , \quad (13,61a)$$

$$E w' = c \hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}} w - m_0 c^2 w' . \quad (13,61b)$$

За да има получената система от линейни хомогенни уравнения нетривиално решение, необходимо е детерминантата от коефициентите пред неизвестните w и w' да бъде равна на нула, т.е.

$$\begin{vmatrix} E - m_0 c^2 & -c \hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}} \\ -c \hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}} & E + m_0 c^2 \end{vmatrix} = 0 , \quad (13,62)$$

откъдето получаваме

$$E^2 - m_0^2 c^4 = c^2 (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}})^2 . \quad (13,63)$$

Изразът $(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}})^2$ се преобразува с помощта на известните свойства на матриците на Паули (вж. Лекция 12) :

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \hat{I} , \quad \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y = i \hat{\sigma}_z , \quad \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z = i \hat{\sigma}_x , \quad \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x = i \hat{\sigma}_y$$

Лесно се получава, че

$$(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}})^2 = \hat{I} \vec{p}^2 = \vec{p}^2 , \quad (13,64)$$

откъдето получаваме собствените стойности на енергията

$$E = \pm \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2} . \quad (13,65)$$

В случая, когато w е произволна матрица, получаваме

$$w' = \frac{c \vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E + m_0 c^2} w , \quad (13,66)$$

а когато за произволна матрица се приеме w' – имаме

$$w = \frac{c \vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E - m_0 c^2} w' . \quad (13,67)$$

Ако изберем оста Oz да има посоката на вектора на импулса, съответните вълнови функции ще имат вида :

$$u = \begin{pmatrix} A \\ B \\ \frac{c p_z}{E + m_0 c^2} A \\ \frac{c p_z}{E + m_0 c^2} B \end{pmatrix}, \quad (13,68)$$

когато w е произволна ;

$$v = \begin{pmatrix} \frac{c p_z}{E - m_0 c^2} D \\ \frac{c p_z}{E - m_0 c^2} F \\ D \\ F \end{pmatrix}, \quad (13,69)$$

когато w' е произволна.

В (13,68) и (13,69) елементите A, B, D и F са произволни константи. В нерелативистично приближение, при $E = m_0 c^2$ и $E = -m_0 c^2$, от (13,66) и (13,67) получаваме съответно:

$$\begin{aligned} 1. \text{ При } E = m_0 c^2, \quad w' = \frac{c p_z}{2 m_0 c^2} w \approx 0, \quad u &= \begin{pmatrix} A \\ B \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \\ 2. \text{ При } E = -m_0 c^2, \quad w = -\frac{c p_z}{2 m_0 c^2} w' \approx 0, \quad v &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ D \\ F \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Така, в нерелативистично приближение двете компоненти на вълновите функции се оказват малки в сравнение с другите две компоненти. За положителна енергия, w е голямо в сравнение с w' , а при отрицателна енергия – обратно.

Както се вижда от (13,65), между най-малката възможна стойност на положителните енергии $E = m_0 c^2$ (при $\vec{p} = 0$) и най-голямата стойност на отрицателните енергии $E = -m_0 c^2$ има енергетичен интервал $2 m_0 c^2$. В класическата физика интерпретацията на частици с отрицателна енергия среща принципиални трудности. Състоянията, съответстващи на отрицателна енергия, на пръв поглед са нереални, понеже областта на отрицателните енергии се простира до безкрайност и, следователно, не съществува най-ниско енергетично ниво. Това означава, че нито едно от състоянията с отрицателна

енергия не може да бъде устойчиво, понеже винаги е възможен спонтанен преход към по-ниско енергетично състояние.

За да отстрани трудностите, свързани с въвеждането в теорията на частици с отрицателна енергия, Дирак в 1931 г. въвежда понятието **вакуум (вакуум на Дирак)** като такова състояние на пространството, в което всички състояния с отрицателна енергия са заети от електрони, а всички състояния с положителна енергия са свободни. Съгласно принципа на Паули, във всяко състояние с отрицателна енергия се намира по един електрон. Ясно е, че енергията и електричният заряд на вакуума на Дирак са безкрайно големи величини. Обаче, съгласно хипотезата на Дирак, наблюдаеми се явяват само такива величини, които характеризират отклонението от вакуумното състояние. Вероятността за преход от състояния с отрицателна енергия в състояния с положителна енергия се оказва различна от нула. Ако един електрон премине от отрицателно ниво с енергия $-|E|$ на положително, то в състоянията с отрицателна енергия се образува “дупка” и тя е наблюдаема. Тази “дупка” се държи като частица, притежаваща : енергия $+|E|$, равна на положителната енергия на електрона ; заряд, който е противоположен по знак на заряда на електрона , т.е. $|e|$ и маса, равна на масата на електрона. Такава частица, явяваща се античастица на електрона, се нарича **позитрон**. Тя е открита от Андерсон в космическите лъчи няколко години след появяването на теорията на Дирак. Появата на “дупка”, съпроводена от преход на електрона от състояние с отрицателна енергия в състояние с положителна енергия, представлява така нареченото **раждане на двойка електрон – позитрон**. Явлението изчезване на позитрона е преход на електрона от ниво с положителна енергия на ниво с отрицателна енергия – известно като **анихилация на двойка електрон – позитрон**.

Образуването на двойка електрон – позитрон се осъществява за сметка на поглъщане на γ -фотон (с енергия $\hbar\omega \geq 2m_0c^2$) от електрона, намиращ се на отрицателно енергетично ниво и само в присъствие на трета частица. Тази трета частица, приемаща излишния импулс на γ -фотона, в присъствие на която се образува двойката електрон – позитрон, обикновено се явява ядро и съответстващата схема може да бъде записана така :

$$\gamma + Ze \rightarrow Ze + e^+ + e^- ,$$

където с e^+ е означен позитрона, с e^- – електрона, а Ze е зарядът на ядрото. При това енергията на γ -фотона трябва да е по-голяма от $2m_0c^2$.

Анихилацията на двойката електрон – позитрон се съпровожда с изпускане на най-малко два γ -фотона. Ако се предположи, че в резултат на анихилация се появява само един γ -фотон, то може да се направи заключението, че импулсът на γ -фотона е равен на нула. Ако в резултат на

анихилация на двойка електрон – позитрон се появят два γ -фотона, то законът за запазване на импулса има вида

$$\vec{p}_- + \vec{p}_+ = \hbar(\vec{k}_1 + \vec{k}_2) ,$$

където $\vec{p}_-$, $\vec{p}_+$, $\hbar\vec{k}_1$ и $\hbar\vec{k}_2$ са, съответно, импулсите на електрона, позитрона и двата γ -фотона.

Трябва да отбележим, че освен приведената трактовка на Дирак, в квантовата теория на полето съществува и друга интерпретация на състоянията на частици с отрицателни енергии.

Сега ще покажем, че при извършване на нерелативистичен преход, от уравнението на Дирак, описващо движението на частица във външно електромагнитно поле

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = [c \hat{\alpha} \cdot (\hat{p} - e\vec{A}) + m_0 c^2 \hat{\beta}] \Psi + V \Psi , \quad (13,70)$$

където $\vec{A}$ е магнитният векторен потенциал на електромагнитното поле, а $V = e\varphi$ (като φ е скаларният потенциал на това поле), се получава уравнението на Паули (12,28). За тази цел използваме унитарната трансформация

$$\Psi = \Psi' e^{i \frac{m_0 c^2}{\hbar} t} , \quad (13,71)$$

където $\Psi' = \Psi'(\mathbf{r}, t)$. Заместваме (13,71) в (13,70) и получаваме

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} = [c \hat{\alpha} \cdot (\hat{p} - e\vec{A}) + m_0 c^2 (\hat{\beta} - 1) + V] \Psi' . \quad (13,72)$$

Ако представим биспинора Ψ' във вида $\Psi' = \begin{pmatrix} w \\ w' \end{pmatrix}$, аналогично на случая за свободна частица, от (13,72) получаваме уравненията :

$$i\hbar \frac{\partial w}{\partial t} = c \hat{\sigma} \cdot (\hat{p} - e\vec{A}) w' + V w , \quad (13,73a)$$

$$i\hbar \frac{\partial w'}{\partial t} = c \hat{\sigma} \cdot (\hat{p} - e\vec{A}) w - 2m_0 c^2 w' + V w' . \quad (13,73b)$$

В уравнение (13,73б) пренебрегваме $i\hbar \frac{\partial w'}{\partial t}$ и $V w'$ в сравнение с изразите $\hat{\vec{\sigma}} \cdot (\hat{\vec{p}} - e \vec{A}) w$ и $2m_o c^2 w'$, съдържащи c . Тогава за w' получаваме

$$w' = \frac{1}{2m_o c} \hat{\vec{\sigma}} \cdot (\hat{\vec{p}} - e \vec{A}) w . \quad (13,74)$$

Като заместим (13,74) в (13,73а), получаваме

$$i\hbar \frac{\partial w}{\partial t} = \frac{(\hat{\vec{\sigma}} \cdot (\hat{\vec{p}} - e \vec{A}))^2}{2m_o} w + V w . \quad (13,75)$$

Ако в известното тъждество [2]

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{a}})(\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{b}}) = \hat{\vec{a}} \cdot \hat{\vec{b}} + i \vec{\sigma} \cdot (\hat{\vec{a}} \times \hat{\vec{b}})$$

положим $\hat{\vec{a}} = \hat{\vec{b}} = \hat{\vec{p}} - e \vec{A}$, получаваме

$$\begin{aligned} [\vec{\sigma} \cdot (\hat{\vec{p}} - e \vec{A})]^2 &= (\hat{\vec{p}} - e \vec{A})^2 + i \vec{\sigma} \cdot [(\hat{\vec{p}} - e \vec{A}) \times (\hat{\vec{p}} - e \vec{A})] = \\ &= (\hat{\vec{p}} - e \vec{A})^2 - i e \vec{\sigma} \cdot [(\hat{\vec{p}} \times \vec{A}) + (\vec{A} \times \hat{\vec{p}})] = \\ &= (\hat{\vec{p}} - e \vec{A})^2 - \hbar e \vec{\sigma} \cdot \text{rot } \vec{A} = (\hat{\vec{p}} - e \vec{A})^2 - e \hbar \mu_o \vec{\sigma} \cdot \vec{H} , \end{aligned} \quad (13,76)$$

тъй като

$$\text{rot } \vec{A} = \mu_o \vec{H} . \quad (13,77)$$

Така, в нерелативистичен преход двукомпонентната вълнова функция w удовлетворява уравнението на Паули (вж. (12,28)) :

$$i\hbar \frac{\partial w}{\partial t} = \left[\frac{(\hat{\vec{p}} - e \vec{A})^2}{2m_o} + V - \frac{e \hbar \mu_o}{2m_o} \vec{\sigma} \cdot \vec{H} \right] w . \quad (13,78)$$