отраженную от барьера волну, а второй

$$\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_a^x p\,dx\right\} \underset{x\to-\infty}{\sim} e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

падающую на барьер волну.

Тогда решение $\psi_{\rm III}$ — это прошедшая сквозь барьер волна (туннельный эффект).

Пусть падающая волна имеет вид $e^{\frac{ipx}{\hbar}}$, отраженная $Ae^{-\frac{ipx}{\hbar}}$, а прошедшая $Be^{\frac{ipx}{\hbar}}$. *Коэффициентом отражения* называется величина $\dfrac{|A|^2}{|A|^2+|B|^2}$, а *коэффициентом прохождения* — величина $D=\dfrac{|B|^2}{|A|^2+|B|^2}$.

7. Уравнение Дирака. Релятивистская теория электрона

Уравнение $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\sum\frac{\partial^2\psi}{\partial x_i^2}$ инвариантно относительно преобразований Галилея, но релятивистски неинвариантно. Это видно хотя бы из того, что t и x_i входят несимметрично.

Пусть $(x^0=ct, x^1, x^2, x^3)$ — 4-вектор.

$$\psi=\psi(x^0,x^1,x^2,x^3) \text{ и } \hat{p}_0 = i\hbar\frac{\partial}{\partial x^0}, hatp_k = i\hbar\frac{\partial}{\partial x^k}, hatp_\mu = i\hbar\frac{\partial}{\partial x^\mu}$$

— тоже 4-векторы.

Классический релятивистски инвариантный гамильтониан свободной частицы имеет вид $H = \mathrm{const}\,\sqrt{m^2c^2+p^2}$, поэтому квантование дает уравнение

$$[\hat{p}_0 - (m^2c^2+\hat{p}_1^2+\hat{p}_2^2+\hat{p}_3^2)^{1/2}]\psi = 0. \tag{2.57}$$

Домножив на сопряженное значение, получим уравнение, более симметричное относительно p_0 и p_k:

$$[\hat{p}_0^2 - m^2c^2 - \hat{p}_1^2 - \hat{p}_2^2 - \hat{p}_3^2]\psi = 0. \tag{2.58}$$

Это уравнение называют *уравнением Клейна-Гордона*. К сожалению, уравнение (2.58) — не совсем то, что нам нужно. Хотя оно лоренц-инвариантно ($\hat{p}_0^2 - \sum \hat{p}_k^2$ — это квадрат 4-вектора), оно имеет больше решений, чем (2.57), и не является линейным по p_0. Попробуем найти уравнение, которое было бы:

1) лоренц-инвариантно,
2) линейно по p_k, в частности, имело бы первый порядок по времени,
3) и плоские волны $\psi = e^{\frac{iEt}{\hbar}} e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}}$, являющиеся решениями уравнения (2.58), являлись бы его решениями.

Будем искать это уравнение в виде

$$[\hat{p}_0 - \alpha_1 \hat{p}_1 - \alpha_2 \hat{p}_2 - \alpha_3 \hat{p}_3 - \beta]\psi = 0. \tag{2.59}$$

Из-за однородности пространства-времени α и β не должны зависеть от x^μ. Умножив (2.59) на сопряженное значение, получим

$$[p_0^2 - \alpha_i \alpha_j p_i p_j - (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) p_i - \beta^2]\psi = 0.$$

В этом месте можно считать, что α_i и β — не числа, а что-то другое. Дирак назвал их «гиперчислами». В любом случае, это некоторая алгебраическая структура.

Из свойств уравнения получаем соотношения на α_i и β:

$$\begin{cases} \alpha_i + \alpha_j = 2\delta_{ij}; \\ \alpha_j \beta + \beta \alpha_j = 0; \\ \beta^2 = m^2 c^2. \end{cases}$$

Находим, что $\beta = mc\alpha_0$ и все α_k, $k = 0, 1, 2, 3$ образуют алгебру Клиффорда

$$\mathcal{K} = \{\, \alpha_\mu \mid \alpha_\mu \alpha_\nu + \alpha_\nu \alpha_\mu = 2\delta_{\mu\nu}, \quad \mu, \nu = 0, 1, 2, 3 \,\}.$$

Уравнение (2.59) можно переписать в виде

$$[\hat{p}_0 - \vec{\alpha}\hat{\vec{p}} - \alpha_0 mc]\psi = 0. \tag{2.60}$$

Утверждение. Наименьшее представление алгебры $\mathcal{K}$ — четырехмерное. Следовательно, ψ — четырехкомпонентная функция. В физической литературе ψ называют *спинорами*.

Одна из реализаций этого представления:

$$\alpha_0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix},$$

где

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

Четырехкомпонентность релятивистской квантовой частицы связана с тем, что что не существует двумерных представлений группы Лоренца. Правда, существуют двумерные представления группы собственных преобразований группы Лоренца.

Выключение магнитного поля

Следуя классическому правилу, гамильтониан частицы в электромангнитном поле можно получить, сделав замену

$$\begin{cases} p_0 \to p_0 + \dfrac{e}{c} A_0, \\ \vec{p} \to \vec{p} + \dfrac{e}{c} \vec{A}. \end{cases}$$

Получаем уравнение в поле

$$\left[\hat{p}_0 + \frac{e}{c} A_0 - \vec{\alpha}\left(\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c}\vec{A}\right) - \alpha_0 mc\right] \psi = 0. \qquad (2.61)$$

Из вида замены сразу получается лоренц-инвариантность уравнения (2.61).

Можно проверить, что (2.61) инвариантно относительно калибровочных преобразований $A_\mu \mapsto A_\mu + \frac{\partial f}{\partial x^\mu}$, $\psi \mapsto ei\frac{e}{\hbar c}\psi$.

Инвариантность уравнения Дирака относительно преобразований Лоренца

Начиная с этого параграфа перестанем писать символ «ˆ» над операторами. Перепишем уравнение (2.61). Для этого умножим (2.61) слева на α_0 и, введя новые переменные

$$\Delta_\mu = p_\mu + \frac{e}{c}A_\mu, \qquad \gamma^0 = \alpha_0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix},$$
$$\gamma_i = -\alpha_0\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix},$$

получим уравнение

$$(\gamma^\mu \Delta_\mu - mc)\psi(x) = 0. \tag{2.62}$$

Переменные γ^μ удовлетворяют условиям $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}\mathbb{1}$, где $\{a, b\} = ab + ba$, а

$$(g^{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

— стандартная лоренцева метрика.

Чтобы понять, как ведет себя при преобразованиях Лоренца решение уравнения (2.62), воспользуемся лоренц-инвариантностью (2.62), сделав бесконечно малое преобразование Лоренца $\tilde{x}^\mu = a^\mu_\nu x^\nu$, где $a^\mu_\nu = \delta^\mu_n u + \omega^\mu_\nu$ и $\omega^\lambda_\mu g^\nu_\lambda + g^\mu_\lambda \omega^\nu_\lambda = 0$. Тогда

$$\begin{cases} \quad x^\mu \to \tilde{x}^\mu = x^\mu + \omega^\mu_\nu x^\nu, \\ \quad p^\mu \to \tilde{p}^\mu = p^\mu + \omega^\mu_\nu p^\nu, \\ \psi(x) \to \tilde{\psi}(x), \\ \quad \Delta_\mu \to \tilde{\Delta}_\mu = a^\nu_\mu \Delta_\nu. \end{cases}$$

Симметрия уравнения (2.62) означает, что $\tilde{\psi}(x) = S(a)\psi(x)$ является решением уравнения (2.62), где $S(a)$ — неизвестная матрица ($\tilde{\psi}_i(x)$ являются линейными комбинациями $\psi_i(\tilde{x})$), т. е. выполняется равенство

$$[\gamma^\mu \Delta_\mu - mc]S(a)\psi(\tilde{x}) = 0.$$

Домножив слева на $S(a)^{-1}$ и вспомнив, что $\tilde{p}_\mu = a^\nu_\mu p_\nu$, $p_\mu = \bar{a}^\nu_\mu \tilde{p}_\nu$, где $\bar{a}^\nu_\mu a^\lambda_\nu = \delta^\lambda_\mu$, приведем последнее уравенение к точке $\tilde{x}$:

$$[S^{-1}\gamma^\mu S \bar{a}^\nu_\mu \tilde{\Delta}_\nu - mc]\psi(\tilde{x}) = 0.$$

Это уравнение совпадает с уравнением Дирака, если $S(a)$ удовлетворяет условию

$$s^{-1}\gamma^\mu S\bar{a}^\nu_\mu = \gamma^\nu, \qquad \text{или} \qquad S^{-1}\gamma^\mu S = a^\mu_\nu\gamma^\nu. \tag{2.63}$$

Будем искать матрицу S для бесконечно малого преобразования Лоренца в виде $S = \mathbb{1} + \omega^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}$, где $\sigma_{\mu\nu}$ — неизвестные матрицы. Тогда из уравнения (2.63) получаем ($a^\mu_\nu = \delta^\mu_n u + \omega^\mu_\nu$)

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{1}{4}[\gamma_\mu, \gamma_\nu].$$

Магнитный момент электрона

Перепишем уравнение Дирака в виде уравнения Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi, \qquad \text{где} \qquad H = -eA_0 + c\vec{\alpha}\Big(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\Big) + \alpha_0 mc^2$$

и положим $\psi = \binom{u}{v}$. На u и v получим уравнения

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{\partial u}{\partial t} = -eA_0 u + \Big[c\vec{\sigma}\Big(\vec{p} + \dfrac{e}{c}\vec{A}\Big)\Big]v + mc^2 u, \\ i\hbar\dfrac{\partial v}{\partial t} = -eA_0 v + \Big[c\vec{\sigma}\Big(\vec{p} + \dfrac{e}{c}\vec{A}\Big)\Big]v - mc^2 v. \end{cases}$$

Будем искать решение в виде $\psi = e^{-iE_n t/\hbar}\binom{\varphi}{\chi}$, где функции φ, chi не зависят от времени.

Кроме того, перейдем к предельной ситуации $v \ll c$, т. е.будем считать, что $E_n = cm^2 + E$, $E \ll mc^2$. Это означает, что импульсы малы и поля слабо меняются. Подставляя ψ в предыдущую систему, получаем

$$\begin{cases} c(\vec{\sigma}\vec{\nabla})\chi - (E + eA_0)\varphi = 0, \\ \quad (2mc^2 + E + eA_0)\chi = c(\vec{\sigma}\vec{\nabla})\varphi, \end{cases}$$

где $\nabla = p + \frac{e}{c}A$. Из второго уравнения получаем, что $\chi \approx \frac{\vec{\sigma}\vec{\nabla}}{2mc}\varphi$, так как $2mc^2 \gg E + eA_0$. Следовательно, $\chi \ll \varphi$. Подставляя χ в первое уравнение, получаем

$$\left[\frac{(\vec{\sigma}\vec{\nabla})^2}{2m} - eA_0\right]\varphi = E\varphi. \tag{2.64}$$

Вспоминая свойства σ_i, а именно, $\sigma^2 = \mathbb{1}$ и $\sigma_1\sigma_2 = i\sigma_3$ и т. д., получаем

$$(\vec\sigma\vec B)(\vec\sigma\vec C) = (\vec B\vec C) + i(\vec\sigma[\vec B, \vec C]),$$
$$\Big(\vec p + \frac{e}{c}\vec A\Big) \times \Big(\vec p + \frac{e}{c}\vec A\Big) = \frac{e}{c}(\vec p \times \vec A + \vec A \times \vec p) =$$
$$= -i\hbar\frac{e}{c}\operatorname{rot}\vec A = -i\hbar\frac{e}{c}\vec H,$$
$$(\vec\sigma\vec\nabla)^2 = \Big(\vec p + \frac{e}{c}\vec A\Big)^2 + \frac{\hbar e}{c}(\vec\sigma\vec H).$$

Окончательно получаем, что уравнение (2.64) эквивалентно

$$H\varphi = E\varphi,$$

где

$$H = \frac{1}{2m}\Big(\vec p + \frac{e}{c}\vec A\Big)^2 + \frac{\hbar e}{2mc}(\vec\sigma\vec H) - eA_0.$$

Предпоследний член этого гамильтониана по аналогии с классическим гамильтонианом интерпретируется как взаимодействие собственного магнитного момента $\vec\mu = -\frac{\hbar e}{2mc}\vec\sigma$ с магнитным полем $\vec H$.

Найдем выражение для момента количества движения электрона. Будем искать момент в виде $\frac{1}{\hbar}\vec M = \vec L + \vec S = [\vec r, \vec p] + \vec S$, где $\vec S = (s_1, s_2, s_3)$ — постоянные матрицы, и определим $\vec M$ из инвариантности $\vec M$ для свободного электрона. На языке квантовой механики это означает, что $\vec M$ — первый интеграл, т. е. коммутирует с гамильтонианом свободного электрона $H = c\vec\alpha\vec p + \alpha_0 mc^2$. Итак, выполняются уравнения$[\vec M, \vec H] = 0$ или

$$[\vec L, c\vec\alpha\vec p] + [\vec S, c\vec\alpha\vec p] = 0. \tag{2.65}$$

Перепишем (2.65) в терминах операторов l_i и s_i:

$$[l_i, c\alpha_k p_k] + [s_i, c\alpha_k p_k] = 0,$$
$$c\alpha_k[l_i, p_k] + c[s_i, \alpha_k]p_k = 0.$$

(для операторов l_i величины α_k постоянны, а s_i и p_k коммутируют). Последнее уравнение можно переписать, пользуясь перестановочными соотношениями между l_i и p_k, так:

$$i\varepsilon_{ikl}\alpha_k p_l + \begin{bmatrix} 0 & [s_i, \sigma_k] \\ [s_i, \sigma_k] & 0 \end{bmatrix} \tag{2.66}$$

Будем считать (мы опять угадываем ответ), что $s_i = \lambda\sigma_i$. Из (2.66) получаем

$$i\varepsilon_{ikl}\alpha_k p_l + i\varepsilon_{ikl}\begin{bmatrix} 0 & [s_i, p_k] \\ [s_i, \sigma_k] & 0 \end{bmatrix} p_k = 0,$$

или

$$i\varepsilon_{ikl}(\alpha_k p_l + 2\lambda\alpha_l p_k) = 0.$$

Последнее равенство выполняется, если $2\lambda = 1$. Окончательно получаем, что $s_i = \sigma_i/2$. Если обозначить $\vec{\sigma} = (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_3)$, то $\vec{S} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$ и $\frac{1}{\hbar}\vec{M} = \vec{L} + \frac{\vec{\sigma}}{2}$. Исходя из этого, собственный магнитный момент электрона правильно записывать как

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{mc}\left(\frac{\hbar\vec{\sigma}}{2}\right) = -\frac{e\hbar}{mc}\vec{S}.$$

Вспомнив, что орбитальный момент равен

$$\vec{\mu}_{\text{орбитальное}} = \frac{\hbar e}{2mc}\vec{L} = \mu_B\vec{L},$$

где константа $\mu_B = \hbar E/2mc$ называется *магнетоном Бора,* получаем

$$\vec{\mu} = 2\mu_b\vec{S}.$$