§ 17 自由电子Dirac方程的严格解

一. Dirac-Pauli表象下的算符和态矢量

在 Dirac-Pauli表象下，

$$\vec{\alpha}=\begin{pmatrix}0 & \vec{\sigma}\\ \vec{\sigma} & 0\end{pmatrix},\quad \beta=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

写成4D形式，有

$$\alpha_1=\left(\begin{array}{cc|cc} & & & 1\\ & & 1 & \\ \hline & 1 & & \\ 1 & & & \end{array}\right),\qquad \alpha_2=\left(\begin{array}{cc|cc} & & & -i\\ & & i & \\ \hline & -i & & \\ i & & & \end{array}\right)$$

$$\alpha_3=\left(\begin{array}{cc|cc} & & 1 & \\ & & & -1\\ \hline 1 & & & \\ & -1 & & \end{array}\right),\qquad \beta=\left(\begin{array}{cc|cc} 1 & & & \\ & 1 & & \\ \hline & & -1 & \\ & & & -1\end{array}\right)$$

若有外场，则**Dirac**方程可以写为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t)=\left[c\vec{\alpha}\cdot(\hat{P}+e\vec{A})-eV+\beta mc^2\right]\psi(t)$$

自旋算符写为

$$\vec{\Sigma}=\begin{pmatrix}\vec{\sigma} & 0\\ 0 & \vec{\sigma}\end{pmatrix}$$

在**Dirac-Pauli**表象中，上面的**Dirac**方程中态函数是函数空间与**4D**的自旋空间二者直积空间中的矢量，其一般形式可写成一列矩阵，矩阵元是***x,y,z*** 的函数:

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_1(x,y,z)\\ \psi_2(x,y,z)\\ \psi_3(x,y,z)\\ \psi_4(x,y,z)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\end{pmatrix}$$

有时也把**4D**的一列矩阵写成一个二维矩阵，其两个矩阵元 φ_1,φ_2 又分别是两**2D**矩阵：

$$\varphi_1=\begin{pmatrix}\psi_1(x,y,z)\\ \psi_2(x,y,z)\end{pmatrix},\quad \varphi_2=\begin{pmatrix}\psi_3(x,y,z)\\ \psi_4(x,y,z)\end{pmatrix} \tag{17.6}$$

(17.6)式形式的量为旋量,而**(17.5)**式形式的量为双旋量。

二. 自由电子的Dirac方程的求解

1. 厄米算符完备组的确定

对自由电子，$\vec{A}=0, V=0$，**Dirac**方程变为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t)=(c\vec{\alpha}\cdot\hat{P}+\beta mc^2)\psi(t)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t)=(c\vec{\alpha}\cdot\hat{P}+\beta mc^2)\psi(t) \tag{17.7}$$

因V=0，故可令 $$\psi(t)=\psi e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{17.8}$$

代入上式，得ψ满足的定态狄拉克方程

$$(c\vec{\alpha}\cdot\hat{P}+\beta mc^2)\psi=E\psi \tag{17.9}$$

即ψ是自由电子哈密顿

$$\hat{H}=c\vec{\alpha}\cdot\hat{P}+\beta mc^2 \tag{17.10}$$

的本征矢量。

然而对于自由电子来说，这样的本征矢量是高度简并的, 为求出确切的态矢量, 应当找一组包括H 在内的厄米算符完备组,去求这组厄米算符的共同本征矢量。

前面我们讲过，自由电子的动量 $\hat{p}$ 和螺旋度 $\hat{h}$ 都是守恒量，其中

$$\hat{h} = \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma} \cdot \frac{\hat{P}}{P} \tag{17.11}$$

这样可以选择包括 $\hat{H}, \hat{P}, \hat{h}$ 在内的厄米算符完备组。位置空间和自旋空间的自由度都包括了。

2. 共同本征矢量的求解

①先求 $\hat{p}$ 的本征函数

$$\hat{P}\psi = \hat{p}\psi$$

即

$$\hat{P}\begin{pmatrix} \varphi_1(x,y,z) \\ \varphi_2(x,y,z) \end{pmatrix} = \hat{p}\begin{pmatrix} \varphi_1(x,y,z) \\ \varphi_2(x,y,z) \end{pmatrix}$$

在*xyz*表象中，取$\hat{P}=-i\hbar\nabla$得本征值$\vec{p}$ 可为任何实矢量，而 φ_1,φ_2置函数部分均应为 $\exp(i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar)$

$$\psi_{\vec{p}}=\begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix}\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}) \qquad (17.12)$$

式中χ_1,χ_2分别是不含**x, y, z** 的**2D**的一列矩阵。

②令$\psi_{\vec{p}}$ 同时又是$\hat{h}$的本征矢量，以便定出χ_1,χ_2 。

利用式 $\hat{h}=\frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}\cdot\frac{\hat{P}}{P}$，由$\hat{h}\psi=c\psi$ 得

$$\frac{1}{p}\begin{pmatrix}\vec{\sigma}\cdot\vec{p} & 0\\ 0 & \vec{\sigma}\cdot\vec{p}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix}=\pm\begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix}$$

上式右边的±**1**是由这一方程的久期行列式定出的**c**值，与自旋在任何空间的投影都是$\pm\frac{\hbar}{2}$ 一致。

由上式得2×2矩阵方程

$$\frac{1}{p}\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\chi_i=\pm\chi_i \quad (i=1,2)$$

即χ_1,χ_2满足的方程形式上相同，其解最多可以相差一常数。

现在求χ_1。令 $\chi_1=\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix}$

则上述2×2矩阵方程成为

$$\frac{1}{p}(\sigma_x p_x+\sigma_y p_y+\sigma_z p_z)\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix}=\pm\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix}$$

将式 $\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \sigma_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\quad \sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$ 代入整理，得

$$\frac{1}{p}\begin{pmatrix}p_z & p_x-ip_y\\ p_x+ip_y & -p_z\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix}=\pm\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix}$$

取p的方向为(θ,φ)，则上式可化为 $\frac{1}{p}\begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \pm\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \pm\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$$

其解为　　正本征值　$u_2 = \operatorname{tg}\frac{\theta}{2} e^{i\varphi} u_1$

负本征值　$u_2 = -\operatorname{ctg}\frac{\theta}{2} e^{i\varphi} u_1$

代回式 $\chi_1 = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$，得

正本征值对应　　负本征值对应

$$\chi_1 = \chi_+ = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix} \qquad \chi_1 = \chi_- = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \cos\frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix} \qquad (17.16)$$

这里已把 χ_+,χ_- 写成比较对称的形式，并且已经归一化。将上式代回式

$$\psi_{\vec{p}} = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}) \qquad (17.12)$$

中, 并记住 χ_1,χ_2 只差一个常数. 若将此常数写为 $a'_\pm$, 则

$$\psi_{\vec{p}_\pm} = \begin{pmatrix} \chi_\pm \\ a'_\pm\ \chi_\pm \end{pmatrix} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}) \qquad (17.17)$$

这是 $\hat{P},\hat{h}$ 的共同本征矢量，上号的本征值是 $\vec{p},+\frac{\hbar}{2}$,下号的本征值是 $\vec{p},-\frac{\hbar}{2}$ 。下面的任务是决定常数 $a'_\pm$ 。

③令 $\psi_{\vec{p}\pm}$ 是哈密顿的本征矢量，则

$$(c\vec{\alpha}\cdot\hat{p}+\beta mc^2)\begin{pmatrix}\chi_\pm\\ a'_\pm\chi_\pm\end{pmatrix}=E'\begin{pmatrix}\chi_\pm\\ a'_\pm\chi_\pm\end{pmatrix}$$

E' 是哈密顿的本征值，即电子的本征能量。

由式 $\frac{1}{p}\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\chi_i=\pm\chi_i \quad (i=1,2)$ 得

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\chi_i=\pm p\chi_i$$

又 $$\vec{\alpha}=\begin{pmatrix}0 & \vec{\sigma}\\ \vec{\sigma} & 0\end{pmatrix},\quad \beta=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

可将上述本征值方程写为下列形式

$$\begin{pmatrix}mc^2-E' & \pm cp\\ \pm cp & -mc^2-E'\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\chi_\pm\\ a'_\pm\chi_\pm\end{pmatrix}=0$$

其久期方程是 $$\begin{vmatrix} mc^2 - E' & \pm cp \\ \pm cp & -(mc^2 - E') \end{vmatrix} = 0$$

解之得电子的能量

$$E' = \pm\sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} = \pm E \tag{17.18}$$

从而给出 $a'_{\pm}$ 的解为

$$a'_{\pm} = \pm\frac{E' - mc^2}{cp} = \pm\frac{cp}{E' + mc^2}$$

取 $$a = \frac{E - mc^2}{cp} = \frac{cp}{E + mc^2}$$

则 $$a'_{\pm} = \pm a \qquad (E' = E)$$

$$a'_{\pm} = \mp\frac{1}{a} \qquad (E' = -E)$$

将 $a'_{\pm}$ 代入(17.17)式并注意到 $\psi(t)=\psi e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$，最后得到

$\hat{H},\hat{P},\hat{h}$ 的本征值及共同本征矢量如下：

$$\psi_{\vec{p}_{\pm}}=\begin{pmatrix}\chi_{\pm}\\ a'_{\pm}\chi_{\pm}\end{pmatrix}\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)$$
(17.7)

本征值 $\hat{H}$ $\hat{P}$ $\hat{h}$	本征矢量 $\psi(t)=\chi f(x,y,z,t)$
E $\vec{p}$ $+\frac{\hbar}{2}$	$\psi_{+\vec{p}+}(t)=N\begin{pmatrix}\chi_{+}\\ a\chi_{+}\end{pmatrix}e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)}$
E $\vec{p}$ $-\frac{\hbar}{2}$	$\psi_{+\vec{p}-}(t)=N\begin{pmatrix}\chi_{-}\\ -a\chi_{-}\end{pmatrix}e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)}$
$-E$ $\vec{p}$ $+\frac{\hbar}{2}$	$\psi_{-\vec{p}+}(t)=N\begin{pmatrix}a\chi_{+}\\ -\chi_{+}\end{pmatrix}e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}+Et)}$
$-E$ $\vec{p}$ $-\frac{\hbar}{2}$	$\psi_{-\vec{p}-}(t)=N\begin{pmatrix}a\chi_{-}\\ \chi_{-}\end{pmatrix}e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}+Et)}$

其中N为归一化系数 $N=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}}$

由此得出结论：

在相对论理论中，

与非相对论相同，

空间中是一列矩阵.

$\hat{H}$	$\hat{P}$	$\hat{h}$	$\psi(t)=\chi f(x,y,z,t)$
E	$\vec{p}$	$+\frac{\hbar}{2}$	$\psi_{+\vec{p}+}(t)=N\begin{pmatrix}\chi_+\\ a\chi_+\end{pmatrix}e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)}$
E	$\vec{p}$	$-\frac{\hbar}{2}$	$\psi_{+\vec{p}-}(t)=N\begin{pmatrix}\chi_-\\ -a\chi_-\end{pmatrix}e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)}$
$-E$	$\vec{p}$	$+\frac{\hbar}{2}$	$\psi_{-\vec{p}+}(t)=N\begin{pmatrix}a\chi_+\\ -\chi_+\end{pmatrix}e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}+Et)}$
$-E$	$\vec{p}$	$-\frac{\hbar}{2}$	$\psi_{-\vec{p}-}(t)=N\begin{pmatrix}a\chi_-\\ \chi_-\end{pmatrix}e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}+Et)}$

当动量本征值取

阵成为（见上表的自旋波函数χ）

$$\chi_{++}=\begin{pmatrix}1\\0\\a\\0\end{pmatrix},\quad \chi_{+-}=\begin{pmatrix}0\\1\\0\\-a\end{pmatrix},\quad \chi_{-+}=\begin{pmatrix}-a\\0\\1\\0\end{pmatrix},\quad \chi_{--}=\begin{pmatrix}0\\a\\0\\1\end{pmatrix},\quad (17.21)$$

下标表示能量E的符号及自旋 S_z 的方向。

$$\chi_{++}=\begin{pmatrix}1\\0\\a\\0\end{pmatrix},\quad \chi_{+-}=\begin{pmatrix}0\\1\\0\\-a\end{pmatrix},\quad \chi_{-+}=\begin{pmatrix}-a\\0\\1\\0\end{pmatrix},\quad \chi_{--}=\begin{pmatrix}0\\a\\0\\1\end{pmatrix}, \qquad (17.21)$$

由 $a=\dfrac{cp}{E+mc^2}$ 知，低能极限时，$a\approx\dfrac{v}{c}<<1$ ，由此可以看出，在Dirac-Pauli表象中，自旋空间的四个基矢为

$$\varepsilon_{++}=\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix},\quad \varepsilon_{+-}=\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix},\quad \varepsilon_{-+}=\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix},\quad \varepsilon_{--}=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}, \qquad (17.22)$$

前两个描写正能态，后两个描写负能态；对于自由电子的态矢量(17.21)式，$E'=+E$ 的状态中有少量负能态叠加在其上，同样 $=-E$ 状态中也有少量正能态成分。

三. 关于负能态的问题

上面只是形式地解 **Dirac**方程。事实上在相对论经典力学中，一切粒子的总能量都是正的，总能为负的粒子并不存在，然而在前面的解中有一半是负能态。

简单地摈弃负能态是不行的，因为这样破坏其完全性；但也不能简单地承认负能态的存在，因为负能态没有下限，如存在的话，处于正能态的粒子将成为不稳定的，它们将通过跃迁，特别是自发跃迁不断地落入能量较低的负能态中。

狄拉克本人提出了一个理论，认为负能态是存在的，但已充满了电子。由于**Pauli**不相容原理，正能态的电子不会再落入负能态去；而负能态的电子海是不能被观察到的。

相反如果在负能态的电子海中出现一个能量为***-E***，动量为 $\vec{p}$, 螺旋度为+态的空缺（即在 ψ_{-p+} 态上缺少一个电子），则能观察到一个能量为+***E***, 动量为 $-\vec{p}$ 而螺旋度仍为正（即自旋也改变了方向）的带正电荷的粒子。这一理论称为空穴理论。这就从理论上预言了正电子的存在。

虽然不久之后果然发现了正电子，但空穴理论只是一个过渡性理论。从电荷的角度看，弥漫全空间的负电荷无法观察。这种说法虽然可以接受，但从质量的角度则是无法接受的.

在也是Dirac为之奠基的量子电动力学中，并不需要空穴和电子海的概念。 量子电动力学目前已经相当完善，它是关于电子和正电子的圆满的、全面的和符合实验的理论。

由于时间关系，氢原子的求解不再介绍。 ★