第三章　狄拉克方程

§15 电子的相对论运动方程

这里主要讨论符合相对论要求的单电子（自旋1/2）的量子力学，并以粒子数守恒和低能的非相对论量子力学为主。主要内容有：

1. 建立狄拉克方程以及若干有关的概念，为进一步学习全面的相对论理论打基础；

2. 以单电子为研究对象，给出其哈密顿，求得狄拉克方程的严格解。

在本章的处理中电磁场仍看作外场，并按照经典场处理。

§ 15.2　克莱因-高登方程和狄拉克方程

在前面所介绍的量子力学的五个基本原理中，只有原理4，即

微观系统的状态$|\psi(t)>$随时间的变化规律是薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)>=H|\psi(t)>$$

不符合狭义相对论要求，因为其中的H是根据经典非相对论分析力学写出来的．现在任务是改写这个原理中的运动方程，使之符合相对论的要求。

一.克莱因-高登方程的推导

按照相对论的时空对等性要求和方程在洛伦兹变换下的不变性要求，我们在坐标表象下讨论这个问题。

在坐标表象下，外场下单粒子的薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,y,z,t)=\left\{\frac{1}{2m}\left[-i\hbar\nabla-q\vec{A}(\vec{R})\right]^2+qV(\vec{R})\right\}\psi(x,y,z,t)\quad(15.1)$$

将此式与经典单粒子的动能与动量的关系式

$$(E-qV)=\frac{1}{2m}(\vec{p}-q\vec{A})^2\quad(15.2)$$

相比较，发现 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-qV$ 与 $E-qV$ 相对应，而 $i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}-qA_i$ 与 p_i-qA_i 相对应。

第一个相对论运动方程正是仿照这种对应方式而得到的。

根据相对论关系 $(E-qV)^2=c^2p^2+m^2c^4$ (15.3)

并考虑上述对应关系

$$E-qV\to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-qV,\quad p_i-qA_i\to i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}-qA_i$$

并对任意波函数发生作用，有

$$(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-qV)^2\psi(x,y,z,t)=(-\hbar^2c^2\nabla^2+m^2c^4)\psi(x,y,z,t) \tag{15.4}$$

这个方程称为克莱因–高登方程。

在克莱因–高登方程提出后立即发现其有许多问题：

（1）$\psi^*\psi$不是正定的，无法解释为粒子的位置概率；

（令$\psi^*\psi=f(x)$，若对任意x，$f(x)>0$，则 $f(x)$为正定）

(2)总能量有负的本征值，而且没有下限，这将造成严重的困难。因为在量子理论中存在自发跃迁的概念，因而这个方程的所有定态解将不断自发辐射到$-\infty$的能级；

(3)这是一个对时间的二阶方程，解此方程时除了需要初始时刻的 ψ外, 还需要 $\partial\psi/\partial t$ 作为初始条件；

(4)用此方程计算H原子能级与实验值符合得不好；

(5)这一方程除了V=0的自由形式外，无法纳入量子力学已有的体系之中，即无法写成含时薛定谔方程的形式。

总之，克-高方程无法纳入现有量子力学的框架，而且至少对于电子是不适用的。然而又不能简单地否定。因为：

（1）这个方程的非相对论极限$v << c$正是薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,y,z,t) = \left\{ \frac{1}{2m}\left[-i\hbar\nabla - q\vec{A}(\vec{R})\right]^2 + qV(\vec{R}) \right\}\psi(x,y,z,t)$$

（2）从这一方程可以导出一个连续性方程

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla\cdot\vec{j} = 0$$

其中

$$\rho = \frac{1}{2m}\left[\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} - \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right]$$

$$\vec{j} = -\frac{1}{2m}\left[\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi)^*\psi\right]$$

$$\vec{j}=-\frac{1}{2m}[\psi^{*}\nabla\psi-(\nabla\psi^{*})\psi]$$

而上述流密度表达式与非相对论的表达式

$$\vec{J}=-\frac{i\hbar q}{2m}[\psi^{*}\nabla\psi-\psi\nabla\psi^{*}]$$

十分相似。

如此看来，既然克莱因–高登方程符合相对论的要求，那么很可能是态函数不对：

即态函数虽然满足克–高方程，但还要满足另一个比此方程要求更高的方程。

这个要求更高的方程就是狄拉克方程。

二. 狄拉克方程

基于克-高方程的上述情况，狄拉克开始他寻找这个方程的工作。他希望

（1）这首先是一个对时间的一阶方程，以便纳入已有的量子力学框架；

（2）同时又要求它的解仍然满足克-高方程。

于是狄拉克假设自由电子正确的相对论方程应取下列形式：

$$\left\{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-c\alpha_x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)-c\alpha_y\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)-c\alpha_z\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right)-\beta mc^2\right\}\psi(x,y,z,t)=0$$

或简写成

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-c\vec{\alpha}\cdot(-i\hbar\nabla)-\beta mc^2\right]\psi(x,y,z,t)=0 \qquad (15.5)$$

式中$\alpha_i(i=x,y,z)$和 β 是四个与时间和位置无关的待定常量, c是光速。引人c的目的是保证 $\vec{\alpha},\beta$ 无量纲。

为了使满足此方程的态函数仍能满足克−高方程，用

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+c\vec{\alpha}\cdot(-i\hbar\nabla)+\beta mc^2\right]$$

从左边作用到（15.5）上，并与克-高方程（V=A=0）

$$(i\hbar\frac{\partial}{\partial t})^2\psi(x,y,z,t)=(-\hbar^2c^2\nabla^2+m^2c^4)\psi(x,y,z,t)$$

相比较，得待定常数应满足

$$\left.\begin{aligned} &\alpha_x^2=\alpha_y^2=\alpha_z^2=\beta^2=1 \\ &\alpha_i\alpha_j+\alpha_j\alpha_i=0 \quad (i\neq j) \\ &\alpha_i\beta+\beta\alpha_i=0 \quad (i=1,2,3 \text{ or } x,y,z) \end{aligned}\right\} \qquad (15.6)$$

（具体过程看曾谨言《量子力学》卷II p349）

在此情况下，式 $\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-c\vec{\alpha}\cdot(-i\hbar\nabla)-\beta mc^2\right]\psi(x,y,z,t)=0$

既是时间和位置的一阶方程，其解 $\psi(x,y,z,t)$ 又满足克-高方程。

上式就称为狄拉克方程。写成含时薛定谔方程形式为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\hat{H}\psi \qquad (15.7)$$

其中对于自由电子，有

$$\hat{H}=c\vec{\alpha}\cdot\hat{P}+\beta mc^2 \qquad (15.8)$$

对电磁场中的电子，有

$$\hat{H} = c\vec{\alpha}\cdot(\hat{P} - q\vec{A}) + qV + \beta mc^2 \tag{15.9}$$

若 $\vec{A}, V$ 不含时间，则狄拉克方程也有定态解

$$\psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

而 $\psi(x,y,z)$ 满足

$$\hat{H}\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \tag{15.10}$$

从（15.9）式可以看出，$\vec{\alpha}, \beta$ 显然不可能是普通的数，除了满足下式，

$$\left.\begin{aligned} &\alpha_x^2 = \alpha_y^2 = \alpha_z^2 = \beta^2 = 1 \\ &\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 0 \quad (i \neq j) \\ &\alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0 \end{aligned}\right\} \tag{15.6}$$

还应该是厄米的，以保证哈密顿算符的厄米性。

由于哈密顿算符的构成单元 $c\vec{\alpha}\cdot(\hat{P}-q\vec{A})$与单电子哈密顿算符的构成单元$(\hat{P}-q\vec{A})^2/2m$有很大差别，算符 $\vec{\alpha},\beta$ 的作用空间显然不是单电子的函数空间，而是另外一个新的空间。

这样，电子的态函数 $\psi(x,y,z,t)$ 应是在单电子的函数空间和这新的空间的直积空间中的矢量。下一节我们会知道，这个新空间是和电子的自旋有关系的。

以后我们把 $\psi(x,y,z,t)$笼统地写成 ψ，以强调它不是单纯的时空的标量函数，而是这种标量函数空间和另一个空间的直积空间中的矢量。

三. 狄拉克方程的协变形式

概念：(1) 罗仑兹变换

$$\begin{cases} x' = \dfrac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2 / c^2}}, \quad y' = y, \quad z' = z \\ t' = \dfrac{t - vx / c^2}{\sqrt{1 - v^2 / c^2}} \end{cases}$$

(2) 协变

在洛仑兹变换下具有确定的变换性质。

为了展示方程的相对论不变性，常把方程写成协变的形式。为此，令

$$x_\mu = (\vec{x}, \mathrm{i}ct),\ p_\mu = (\vec{p}, \mathrm{i}\frac{E}{c}),\ A_\mu = (\vec{A}, \mathrm{i}\frac{V}{c}), \quad (\mu = 1,2,3,4)$$

将狄拉克方程写成如下形式

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-qV-c\vec{\alpha}\cdot(\hat{P}-q\vec{A})-\beta mc^2\right]\psi=0 \tag{15.12}$$

定义4D形式的动量算符为

$$\hat{P}_\mu=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_\mu}$$

并且定义四个新的算符 （这些算符在后面的推导中非常重要）

$$\left.\begin{aligned}\gamma_i&=-i\beta\alpha_i,\quad(i=1,2,3)\\ \gamma_4&=\beta\end{aligned}\right\} \tag{15.13}$$

用 $-\beta$ 左乘（15. 12）式，利用

$$-\beta\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-qV\right)\to-\gamma_4(E-qV)=-\gamma_4\left(\frac{c}{i}\hat{P}_4-q\frac{c}{i}A_4\right)=ic\gamma_4\left(\hat{P}_4-qA_4\right)$$

这样就得到狄拉克方程的协变形式

$$\left[ic\sum_{\mu}\gamma_{\mu}\left(\hat{P}_{\mu}-qA_{\mu}\right)+mc^{2}\right]\psi=0 \qquad (15.14)$$

可证明（这里不证）Dirac方程在洛伦兹变换、空间反演和时间反演下确实是协变的。

式

$$\left.\begin{aligned}&\gamma_{i}=-i\beta\alpha_{i}, \quad (i=1,2,3)\\&\gamma_{4}=\beta\end{aligned}\right\} \qquad (15.13)$$

引进的四个新算符 γ_{μ} 满足以下关系

$$\left.\begin{aligned}&\gamma_{1}^{2}=\gamma_{2}^{2}=\gamma_{3}^{2}=\gamma_{4}^{2}=1\\&\gamma_{\mu}\gamma_{\nu}+\gamma_{\nu}\gamma_{\mu}=0, \ (\mu\neq\nu)\end{aligned}\right\} \qquad (15.15)$$

$$\left.\begin{aligned}\gamma_i &= -i\beta\alpha_i, \quad (i=1,2,3)\\ \gamma_4 &= \beta\end{aligned}\right\} \tag{15.13}$$

再定义 γ_5 ： $$\gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4 \overset{(15.13)式}{\underset{代入}{===}} \mathrm{i}\,\alpha_1\alpha_2\alpha_3 \tag{15.16}$$

则有 $$\gamma_\mu\gamma_5 + \gamma_5\gamma_\mu = 0 \quad (\mu = 1,2,3,4) \tag{15.17}$$

γ_μ 称为 γ 算符。由于常以矩阵的形式出现，又常之为γ矩阵。

既然 $\vec{\alpha}, \beta$ 都是厄米算符，根据前面的定义，γ 算符和 γ_5 算符也是厄米的。此外由厄米性及式

$$\gamma_1^2 = \gamma_2^2 = \gamma_3^2 = \gamma_4^2 = 1$$

可知四个 γ 算符以及 $\vec{\alpha}, \beta$ 都是幺正的。

§15.3 自旋算符

前面在建立Dirac方程的过程中引入了算符 $\vec{\alpha},\beta,\gamma_\mu$，这就是说，在整体运动的位形Hilbert空间之外又发现了一个新的空间，我们说过这个新空间与自旋有关。

一. 自旋算符的寻找

1. 从对易关系入手

设电子的自旋算符为S，它应满足角动量对易关系和自旋算符的反对易关系。

令 $\vec{S}=\frac{1}{2}\hbar\vec{\Sigma}$，则 $\vec{\Sigma}$ 的三个分量应满足

$$\Sigma_i^2=1, \qquad i=1,2,3$$

$$\Sigma_i\Sigma_j+\Sigma_j\Sigma_i=0, \qquad i\neq j$$

$$[\Sigma_i,\Sigma_j]=2i\sum_k\varepsilon_{ijk}\Sigma_k$$

为了寻找满足这些关系的Σ（也称自旋算符），试用 $\vec{\alpha},\beta$ 来构造。

由前面所得结论可知，算符 α_i 满足

$$\Sigma_i^2 = 1, \quad i = 1,2,3 \tag{15.18}$$

$$\Sigma_i\Sigma_j + \Sigma_j\Sigma_i = 0 \quad i \neq j \tag{15.19}$$

但不满足

$$[\Sigma_i, \Sigma_j] = 2\mathrm{i}\sum_k \varepsilon_{ijk}\Sigma_k \tag{15.20}$$

若取两个 α 的乘积，肯定满足（15. 19）式：

$$\Sigma_1 = c\alpha_2\alpha_3, \Sigma_2 = c\alpha_3\alpha_1, \Sigma_3 = c\alpha_1\alpha_2 \tag{15.21}$$

注意：c 是待定常数，不是光速！

为使（15. 18）式得到满足，c可以是±i。

对于
$$[\Sigma_i,\Sigma_j]=2\mathrm{i}\sum_k \varepsilon_{ijk}\Sigma_k \tag{15.20}$$

因为
$$[\Sigma_1,\Sigma_2]=2\Sigma_1\Sigma_2=2c^2\alpha_2\alpha_3\alpha_3\alpha_1=-2c\Sigma_3$$

所以只要取 $c=-i$，则找到了满足正确对易关系的自旋算符：

$$\vec{S}=\frac{1}{2}\hbar\vec{\Sigma},\quad \Sigma_i=-\frac{i}{2}\sum_{jk}\varepsilon_{ijk}\alpha_j\alpha_k$$

也可写成紧凑的形式

$$\vec{\Sigma}=-\frac{i}{2}\vec{\alpha}\times\vec{\alpha}$$

容易验证，上式即

$$\Sigma_1=-i\alpha_2\alpha_3=-i\gamma_2\gamma_3=-i\Sigma_2\Sigma_3$$
$$\Sigma_2=-i\alpha_3\alpha_1=-i\gamma_3\gamma_1=-i\Sigma_3\Sigma_1$$
$$\Sigma_3=-i\alpha_1\alpha_2=-i\gamma_1\gamma_2=-i\Sigma_1\Sigma_2$$

利用式 $\left.\begin{aligned}&\gamma_i = -i\beta\alpha_i, \quad (i=1,2,3)\\ &\gamma_4 = \beta\end{aligned}\right\}$ 可推知反过来的关系

$$\gamma_i\gamma_j = \alpha_i\alpha_j = \Sigma_i\Sigma_j = i\sum_k \varepsilon_{ijk}\Sigma_k$$

此外，有

$$\vec{\Sigma}\cdot\vec{\Sigma} = 3, \quad S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$$

2.一些算符的关系

对于上面给出的算符，容易证明

$$[\alpha_i, \Sigma_j] = [\Sigma_i, \alpha_j] = 2i\sum_k \varepsilon_{ijk}\alpha_k$$

$$[\beta, \Sigma_i] = 0$$

设A,B是位形空间的算符，因而与新的自旋空间的算符$\vec{\alpha},\beta,\gamma_\mu$对易，即

$$(\vec{\Sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\Sigma}\cdot\vec{B})=\sum_{ij}\Sigma_i\Sigma_jA_iB_j$$

利用 $\alpha_i\alpha_j=\Sigma_i\Sigma_j=\mathrm{i}\sum_k\varepsilon_{ijk}\Sigma_k$

$$=\sum_{ij}(\delta_{ij}+i\sum_k\varepsilon_{ijk}\Sigma_k)A_iB_j$$

$$=\vec{A}\cdot\vec{B}+i\vec{\Sigma}\cdot\vec{A}\times\vec{B}$$

另外还有

$$(\vec{\alpha}\cdot\vec{A})(\vec{\alpha}\cdot\vec{B})=\vec{A}\cdot\vec{B}+i\vec{\Sigma}\cdot\vec{A}\times\vec{B}$$

$$(\vec{\alpha}\cdot\vec{A})(\vec{\Sigma}\cdot\vec{B})=(\vec{\Sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\alpha}\cdot\vec{B})=-\gamma_5\vec{A}\cdot\vec{B}+i\vec{\alpha}\cdot\vec{A}\times\vec{B}$$

以上各式利用有关算符的定义及算符的运算公式比较容易推出。

二. 自由电子的守恒量

已知自由电子的哈密顿为

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

1.自旋角动量是否守恒量?

$$\because \quad [\hat{H},\vec{S}] = \frac{\hbar}{2}[\hat{H},\vec{\Sigma}]$$

$$= \frac{\hbar}{2}\left\{c\hat{P}\cdot[\vec{\alpha},\vec{\Sigma}] + mc^2[\beta,\vec{\Sigma}]\right\} \qquad \text{利用}\ [\beta,\Sigma_i]=0$$

$$= \frac{\hbar}{2}c\hat{P}\cdot[\vec{\alpha},\vec{\Sigma}]$$

$$= \frac{\hbar}{2}c\sum_{ij}\hat{P}_i[\alpha_i,\Sigma_j]\vec{j} \qquad \text{利用}\ [\alpha_i,\Sigma_j]=[\Sigma_i,\alpha_j]=2i\sum_k \varepsilon_{ijk}\alpha_k$$

$$= i\hbar c\vec{\alpha}\times\hat{P}$$

所以自由电子的自旋并不是守恒量。

2. 轨道角动量是否守恒量？

$$\because \quad [\hat{H},\vec{L}]=[c\vec{\alpha}\cdot\hat{P}+\beta mc^2,\vec{R}\times\hat{P}]$$

$$=c[\vec{\alpha}\cdot\hat{P},\vec{R}\times\hat{P}]$$

$$=\sum_{ij}c\alpha_i[\hat{P}_i,R_j]\vec{j}\times\hat{P}$$

$$=-i\hbar c\vec{\alpha}\times\hat{P}$$

所以自由电子的轨道角动量不是守恒量。

3. 总角动量是否守恒量？

由前可知，对角动量 $\vec{J}=\vec{L}+\vec{S}$

$$[\hat{H},\vec{J}]=[\hat{H},\vec{L}]+[\hat{H},\vec{S}]=0$$

所以总角动量是守恒量。对于自由电子，这是一个必然的结果，这说明自旋算符的构造 $\vec{S}=\frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}$ 是正确的。

4. 自由电子的动量P是否守恒量？

由 $\hat{H}=c\vec{\alpha}\cdot\hat{P}+\beta mc^2$ 前可知 $[\hat{H},\hat{P}]=0$

故自由电子的动量P显然是守恒量。

5. 自由电子的螺旋度是否守恒量?

定义螺旋度为自旋在动量方向上的投影，即

$$\hat{h}=\vec{S}\cdot\frac{\hat{P}}{P}$$

$$\because\quad [\hat{H},\hat{h}]=\frac{c\hbar}{2P}[\vec{\alpha}\cdot\hat{P},\vec{\Sigma}\cdot\hat{P}]$$

$$=\frac{c\hbar}{2P}\sum_{ij}\hat{P}_i[\alpha_i,\Sigma_j]\hat{P}_j$$

利用 $[\alpha_i,\Sigma_j]=2\mathrm{i}\sum_k\varepsilon_{ijk}\alpha_k$

$$=\frac{c\hbar}{2P}\sum_{ijk}2i\varepsilon_{ijk}\hat{P}_i\hat{P}_j\alpha_k$$

$$=\frac{c\hbar}{2P}2i\hat{P}\times\hat{P}\cdot\vec{\alpha}=0$$

所以自由电子的螺旋度是一个守恒量。