第四章　相对论量子力学

薛定谔方程是量子力学的基本方程，但其实非相对论的，只能描述速度远小于光速的粒子的运动。由于其时间坐标和空间坐标处于不同等的地位：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right]\Psi$$

波函数对时间坐标为一阶导数，而对空间坐标则是二阶导数，薛定谔方程并不满足相对论的协变性的要求。由于几率守恒，薛定谔方程不能描写粒子的产生和湮灭。

差不多在薛定谔方程提出的同时（1926 年），薛定谔、克莱因、戈登等人建立了相对论性的波动方程，后来成为克莱因－戈登（Klein－Gordon）方程，即Ｋ－Ｇ方程：

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi=(-\hbar^2c^2\nabla^2+m^2c^4)\Psi$$

其中c为光速，m为粒子质量。

于此同时（1928 年），狄拉克提出了电子的相对论性波动方程：

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+i\hbar\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\nabla}-\beta mc^2\right]\Psi=0$$

其中$\boldsymbol{\alpha}$、β是与坐标和动量无关的算符，该方程对时间和空间坐标都是一阶导数。

K－G 方程起初由于“负几率”困难而未被重视，直到 1934 年，泡利（Pauli）等给Ｋ－Ｇ方程新的诠释：它不是一个单粒子的方程，而是一个场方程，并且进行了量子化。同样的狄拉克方程也是场方程。Ｋ－Ｇ方程、狄拉克方程、麦克斯韦（Maxwell）方程分别对应于标量场、旋量场和矢量场（零质量）的场方程，描述自旋为零、$\hbar/2$和$\hbar$（零质量）的粒子。

§1 克莱因－高登方程（Ｋ－Ｇ方程）

薛定谔方程可以由如下方式由经典向量子系统过渡而得到：

$$E^2=\frac{p^2}{2m}+V$$

$$\Downarrow$$

$$E\to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\quad \boldsymbol{p}\to -i\hbar\nabla$$

$$\Downarrow$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{x},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\boldsymbol{x},t)+V\Psi(\boldsymbol{x},t)$$

空间几率密度ρ：

$$\rho=\Psi(\boldsymbol{x},t)\Psi^*(\boldsymbol{x},t)\geq 0$$

几率密度流:

$$\boldsymbol{j}=\frac{1}{2m}\left[\Psi^*(-i\hbar\nabla)\Psi+\Psi(i\hbar\nabla)\Psi^*\right]$$

几率密度流可以对应于经典力学中的:$\boldsymbol{j}=\rho\boldsymbol{v}$，其中$\boldsymbol{v}=\boldsymbol{p}/m$。

上述几率密度和密度流满足连续性方程（对应于定域的几率守恒）：

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

仿薛定谔方程的得到方式，将其推广到相对论（自由粒子）形式：

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$$

$$\Downarrow$$

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad \boldsymbol{p} \to -i\hbar\nabla$$

$$\Downarrow$$

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi(\boldsymbol{x},t) = (-\hbar^2c^2\nabla^2 + m^2c^4)\Psi(\boldsymbol{x},t)$$

上述方程称为克莱因－高登方程（Ｋ－Ｇ方程）。

Ｋ－Ｇ方程可以写成如下的协变形式：

$$(\partial_\mu\partial^\mu + \kappa)\Psi(x) = 0, \quad \mu = 1,2,3,4$$

$$x_4 = ict, \quad \kappa = \frac{mc}{\hbar}$$

其中Ψ可以是标量、矢量或张量。

a） 负能量困难

考虑 K—G 方程的平面波解：

$$\Psi = \mathcal{A}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et)\right]$$

代入 K—G 方程后，可得：

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$$

$$\Downarrow$$

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

其中$E = -\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} < 0$也是粒子的能量本征值，也即 K—G 方程存在负能量困难。

b） 负几率困难

如果定义相对论下的几率密度流为（由$\boldsymbol{j} = \rho\boldsymbol{v}$、$\boldsymbol{v} = \dot{\boldsymbol{x}} = -i[\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{H}]/\hbar$过渡得到）：

$$\boldsymbol{j} = \frac{1}{2m}\left[\Psi^*(-i\hbar\nabla)\Psi + \Psi(i\hbar\nabla)\Psi^*\right]$$

可以推知，若几率密度ρ定义为：

$$\rho = \frac{1}{2mc^2}\left[\Psi^*(i\hbar\frac{\partial}{\partial t})\Psi + \Psi(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t})\Psi^*\right]$$

由于存在对时间的偏导数，因此几率密度不是正定的。

几率密度诠释：$e\rho$、$e\boldsymbol{j}$诠释为电荷密度和电流密度。

c） 非相对论极限

提取静止能mc^2，将波函数写成如下形式：

$$\Psi \to \Psi\exp\left[-\frac{i}{\hbar}mc^2t\right]$$

代入 K—G 方程后：

$$\left[mc^2+i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right]^2\Psi=(\hat{p}^2c^2+m^2c^4)\Psi$$

展开左边算符：

$$\left[mc^2+i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right]^2=m^2c^4+2mc^2(i\hbar\frac{\partial}{\partial t})+\cdots$$

从而回到自由粒子的薛定谔方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{x},t)=\frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi(\boldsymbol{x},t)$$

d） 规范相互作用

现代量子场论认为，自然界的基本作用都是规范相互作用，也即只要将普通导数换成协变导数即可：

$$\partial_\mu\to D_\mu=\partial_\mu\pm igA_\mu$$

对于电磁相互作用，只要做如下替换：

$$E\to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-q\phi$$

$$\boldsymbol{p}\to -i\hbar\nabla\to -i\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}$$

比如电磁场下的薛定谔方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=\left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-q\Phi\right]\Psi$$

类似的可以写出带电粒子在电磁场中的 K—G 方程。

§2 狄拉克（Dirac）方程

2.1 Dirac 方程的引入

在 K—G 方程中，负几率困难主要是由于波函数对时间的二阶偏导数造成的，因此期望 Dirac 方程中对时间仍然是一阶导数：

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

同时要求 Dirac 方程是相对论协变的，满足洛伦兹协变性，而$E=\sqrt{p^2c^2+m^2c^4}$显然不满足，因为协变性要求对时间和空间是等价的，定义如下哈密顿算符：

$$\hat{H}=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\beta mc^2$$

从而 Dirac 方程变为：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=\hat{H}\Psi=(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\beta mc^2)\Psi$$

简单变形后可得：

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}\right]\Psi=0$$

$$\Downarrow$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}\right]\Psi=0$$

$$\hat{H}\Big[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}\Big]\Psi=0$$

从而可得：

$$\Big[(i\hbar\frac{\partial}{\partial t})^2-\hat{H}^2\Big]\Psi=0$$

带入$\hat{H}$的表达式，整理得：

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\beta^2\Psi-\frac{1}{2}(\alpha_i\alpha_k+\alpha_k\alpha_i)\nabla_i\nabla_k\Psi-\frac{imc}{\hbar}(\alpha_i\beta+\beta\alpha_i)\nabla_i\Psi=0$$

要求次方程仍然满足 K—G 方程，对比 K—G 方程：

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi-\nabla^2\Psi+\frac{m^2c^2}{\hbar}\Psi=0$$

从而：

$$\frac{1}{2}(\alpha_i\alpha_k+\alpha_k\alpha_i)=\delta_{ik}$$

$$\beta^2=1$$

$$\alpha_i\beta+\beta\alpha_i=0$$

因此$\boldsymbol{\alpha}$、β不可能是普通的数，将上式子展开可得：

$$\begin{cases}\alpha_i^2=1 \qquad (i=x,y,z)\\ \alpha_i\alpha_k=-\alpha_k\alpha_i\\ \alpha_i\beta=-\beta\alpha_i\\ \beta^2=1\end{cases}$$

同时若哈密顿量是厄米算符，同时要求$\boldsymbol{\alpha}$、β都是厄米的。

$$\alpha_i^\dagger=\alpha_i \qquad \beta^\dagger=\beta$$

2.2 $\boldsymbol{\alpha}$、β的矩阵表示

$\boldsymbol{\alpha}$、β 为 $\mathrm{N}\times\mathrm{N}$ 矩阵

1） N为偶数

$$\alpha_i\beta=-\beta\alpha_i=(-I)\beta\alpha$$

两边去行列式：

$$\mathrm{Det}\alpha_i\ \mathrm{Det}\beta=\mathrm{Det}(-I)\ \mathrm{Det}\beta\ \mathrm{Det}\alpha_i=(-1)^N\mathrm{Det}\beta\ \mathrm{Det}\alpha_i$$

从而：

$$(-1)^N=1$$

也即 N 必须为偶数。

2） $\mathrm{N}\neq 2$

由于 2 维矩阵反对易的独立算符只有 3 个：$\boldsymbol{\sigma}$，因此$\mathrm{N}\neq 2$。

3） Pauli-Dirac 表象

$$\beta=\begin{pmatrix}\mathrm{I} & 0\\ 0 & \mathrm{I}\end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{\alpha}=\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ \boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix}\ \alpha_i=\begin{pmatrix}0 & \sigma_i\\ \sigma_i & 0\end{pmatrix}$$

上述矩阵形式显然满足$\boldsymbol{\alpha}$、β矩阵的所有性质，称为 Pauli-Dirac 表象。

显然$\boldsymbol{\alpha}$、β经过任意幺正变换后，仍然满足 Dirac 方程要求的所有性质，称为不同表象。

4) Dirac 方程协变形式

取自然单位制：$c = \hbar = 1$，并引入如下γ矩阵：

$$\gamma_i = -i\beta\alpha_i \qquad (i = 1,2,3)$$

$$\gamma_4 = \beta$$

Dirac 方程可以改写为：

$$(\gamma_\mu \partial_\mu + m)\Psi = 0$$

其中$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu}$、$x = (x_1, x_2, x_3, x_4)$、$x_4 = ict$。

显然，γ矩阵满足以下性质：

$$\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}$$

Dirac 方程的共轭形式为：

$$\partial_\mu \overline{\Psi} \gamma_\mu - m\overline{\Psi} = 0 \qquad \overline{\Psi} = \Psi^\dagger \gamma_4$$

该形式在场论中应用非常普遍。

2.3 速度算符、几率守恒

同时用$\Psi^\dagger$左乘 Dirac 方程可得：

$$i\hbar \Psi^\dagger \frac{\partial}{\partial t}\Psi = \Psi^+ c\boldsymbol{\alpha} \cdot (-i\hbar\nabla\Psi) + \beta mc^2 \Psi^+ \Psi$$

相应的共轭形式为：

$$-i\hbar(\frac{\partial}{\partial t}\Psi^\dagger)\Psi = c\boldsymbol{\alpha} \cdot (i\hbar\nabla\Psi^\dagger)\Psi + \beta mc^2 \Psi^+ \Psi$$

两式相减可得：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^+\Psi) = -i\hbar\nabla \cdot (\Psi^+ c\boldsymbol{\alpha}\Psi)$$

从而满足连续性方程：

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

其中

$$\rho = \Psi^\dagger\Psi \quad \boldsymbol{j} = c\Psi^+\boldsymbol{\alpha}\Psi\text{（对应于经典的}\boldsymbol{j} = \rho\boldsymbol{v}\text{）}$$

其中速度算符定义为：

$$\boldsymbol{v} = \dot{\boldsymbol{x}} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{H}] = c\boldsymbol{\alpha}$$

显然，几率密度ρ是正定的。

§3 电磁场中的 Dirac 方程

在 Dirac 方程中，将普通导数换成协变导数后可得到电磁场中的 Dirac 方程：

$$\partial_\mu \to D_\mu \qquad \begin{cases} E \to i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t} - q\phi \\ \boldsymbol{p} \to \hat{\boldsymbol{p}} - \dfrac{q}{c}\boldsymbol{A} \end{cases}$$

电磁场中的 Dirac 方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=\hat{H}\Psi=\left[c\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(-i\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)+mc^2\beta+q\phi\right]\Psi$$

3.1 自旋磁矩

将电磁场中的 Dirac 方程写成如下矩阵形式：

$$\Psi(x)=\begin{bmatrix}\Psi_a(x)\\ \Psi_b(x)\end{bmatrix}$$

$$\hat{H}=\begin{bmatrix} mc^2+q\phi & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(-i\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(-i\hbar\nabla-\dfrac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) & mc^2+q\phi\end{bmatrix}$$

考虑静止场的能量本征方程：

$$令\ W=E-mc^2$$

$$\begin{cases} q\phi\Psi_a+c\boldsymbol{\sigma}\cdot(-i\hbar\nabla-\dfrac{q}{c}\boldsymbol{A})\Psi_b=W\Psi_a\\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot(-i\hbar\nabla-\dfrac{q}{c}\boldsymbol{A})\Psi_a=(2mc^2+W-q\phi)\Psi_b\end{cases}$$

其中第二式可以改写成：

$$\Psi_b=\frac{1}{2mc^2+W-q\phi}c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(-i\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\Psi_a$$

对于非相对论极限：

$$(W,\,e\phi,\,e\boldsymbol{A},\,cp)\ll mc^2$$

从而Ψ_a分量为大量，而Ψ_b为小分量，近似有：

$$\Psi_b\approx\frac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(-i\hbar-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\Psi_a$$

削去小分量Ψ_b有：

$$\left\{\frac{1}{2m}\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(-i\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2+q\phi\right\}\Psi_a=W\Psi_a$$

利用

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$$

从而可得非相对论极限下的哈密顿量为：

$$\hat{H}_{\mathrm{NR}}=\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+q\phi-\frac{q\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathcal{H}$$

其中$\mathcal{H}$为磁场强度，由矢量势$\boldsymbol{A}$决定：

$$\mathcal{H}=\nabla\times\boldsymbol{A}$$

上述哈密顿量中的最后一项代表了粒子的自旋磁矩与磁场的作用能，并且粒子的自旋磁矩算符为：

$$\boldsymbol{\mu}_s=\frac{q\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}$$

比例系数正好为玻尔磁子，狄拉克方程无法给出反常磁矩。

§4 Dirac 方程的平面波解

$$\hat{H} = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \beta mc^2$$

由于

$$[\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{H}] = 0$$

因此动量和能量算符具有共同的本征态，对应于自由粒子的平面波解:

$$\Psi(\boldsymbol{x}, t) = \phi(\boldsymbol{p}) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x} - Et)\right]$$

其中E为哈密顿量的本征值，带入 Dirac 方程后有（Dirac-Pauli 表象）：

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \qquad \hat{H} = \begin{bmatrix} mc^2 & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} \\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} & -mc^2 \end{bmatrix}$$

容易证明：

$$[\hat{H}, \hat{\boldsymbol{L}}] \neq 0 \quad \text{（}\hat{\boldsymbol{L}}\text{不是守恒量）}$$

$$[\hat{H}, \hat{\Sigma}] = 0 \qquad [\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\Sigma}] = 0$$

其中

$$\hat{\Sigma} = \frac{1}{p}\begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} \end{bmatrix}$$

易知$\hat{\Sigma}$的本征值为±1，也即

$$\hat{\Sigma}\,\phi_\pm(\boldsymbol{p}) = \pm\phi_\pm(\boldsymbol{p})$$

同时能量本征值满足如下方程：

$$\mathrm{Det}\begin{bmatrix} mc^2 - E & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} \\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} & -mc^2 - E \end{bmatrix} = 0$$

也即：

$$(m^2c^4 + c^2p^2 - E^2)^2 = 0$$

因此，对于一定的p，能量E有正负两个值：

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

我们用u、v分别表示正负本征值对应的本征矢量，因此有：

	$u_+(p)$	$u_-(p)$	$v_+(p)$	$v_-(p)$
$\hat{H}$	$\lvert E\rvert$	$\lvert E\rvert$	$-\lvert E\rvert$	$-\lvert E\rvert$
$\hat{\Sigma}$	+1	−1	+1	−1

首先易知：

$$\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{p}\xi = \xi \qquad \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{p}\eta = -\eta$$

其中$\boldsymbol{p}$的方向角为(θ, φ)及

$$\xi = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\exp[-i\varphi/2] \\ \\ \sin\frac{\theta}{2}\exp[i\varphi/2] \end{bmatrix} \qquad \eta = \begin{bmatrix} -\sin\frac{\theta}{2}\exp[-i\varphi/2] \\ \\ \cos\frac{\theta}{2}\exp[i\varphi/2] \end{bmatrix}$$

从而

$$u_+, v_+ \sim \begin{bmatrix} c_1\xi \\ c_2\xi \end{bmatrix} \qquad u_-, v_- \sim \begin{bmatrix} c_3\eta \\ c_4\eta \end{bmatrix}$$

带入能量本征方程，并归一化后可得：

$$u_+ = N\begin{bmatrix} \xi \\ \\ \dfrac{cp}{mc^2+|E|}\xi \end{bmatrix} \qquad u_- = N\begin{bmatrix} \eta \\ \\ -\dfrac{cp}{mc^2+|E|}\eta \end{bmatrix}$$

$$v_+ = N\begin{bmatrix} -\dfrac{cp}{mc^2+|E|}\xi \\ \\ \xi \end{bmatrix} \qquad v_- = N\begin{bmatrix} \dfrac{cp}{mc^2+|E|}\eta \\ \\ \eta \end{bmatrix}$$

其中

$$N = \frac{mc^2+|E|}{2|E|}$$

因此自由电子的狄拉克方程的一般解为：

$$\Psi(\boldsymbol{x},t) = a_\pm(p)u_\pm(p)\exp[i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-|E|t)/\hbar] + b_\pm^*(p)v_\pm(p)\exp[-i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-|E|t)/\hbar]$$

其中$a_\pm(p)$、$b_\pm^*(p)$分别为处于正、负能态的几率幅。

附:

$$\sigma_n = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} = \begin{bmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\varphi & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \cos\varphi & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \pm\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

可得:

$$\text{本征值为 1：}\quad \frac{a}{b} = \frac{\sin\theta e^{-i\varphi}}{1-\cos\theta} = \frac{\cos\frac{\theta}{2}}{\sin\frac{\theta}{2}}e^{-i\varphi} = \frac{n_x - in_y}{1-n_x}$$

$$\text{本征值为−1：}\quad \frac{a}{b} = -\frac{1-\cos\theta}{\sin\theta}e^{-i\varphi} = -\frac{\sin\frac{\theta}{2}}{\cos\frac{\theta}{2}}e^{-i\varphi} = -\frac{n_x - in_y}{1+n_x}$$

§ 5 自旋角动量

容易证明，即使没有外场，轨道角动量不守恒：

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\boldsymbol{L}} &= [\hat{\boldsymbol{L}}, \hat{H}] \\ &= [\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}, c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}] \\ &= c[\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}]\times\boldsymbol{p} \\ &= i\hbar\boldsymbol{\alpha}\times\boldsymbol{p} \\ &\neq 0 \end{aligned}$$

另一方面，因为没有外场存在，空间各向同性，系统的总角动量应该守恒，因此必定存在一种内禀的角动量，是的总角动量守恒。

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{bmatrix}$$

容易证明

$$[\boldsymbol{\Sigma}, \hat{H}] = -2ic\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$$

因此构造如下角动量算符

$$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{L}} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}$$

则有

$$[\hat{H}, \hat{\boldsymbol{J}}] = 0$$

因此，要保证总角动量守恒，必须引入如下内禀角动量$\hat{\boldsymbol{s}}$：

$$\hat{\boldsymbol{s}} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}$$

称为电子的自旋角动量算符，在任意方向的本征值为$\pm\hbar/2$。

需要指出的是，上述总角动量算可以直接由 Dirac 方程的空间转动不变性（对应于角动量张量守恒流）得到。

§6 有心力场

在有心力场$V(\boldsymbol{r})$中运动的粒子, 其哈密顿量为:

$$\hat{H} = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \beta mc^2 + V(\boldsymbol{r})$$

在球坐标中, 与r共轭的正则动量是:

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2}(\boldsymbol{r}_0\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{r}_0) = \frac{1}{r}(\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} - i\hbar) = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$$

其中

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{i}{r\hbar}\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \qquad\qquad \boldsymbol{r}_0 = \frac{\boldsymbol{r}}{r}$$

利用公式:

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

可得:

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r}_0)(\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}) &= \frac{1}{r}(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}) \\ &= \frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \frac{i}{r}\boldsymbol{\Sigma}\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}) \\ &= \hat{p}_r + \frac{i\hbar}{r} + \frac{i}{r}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{L}\end{aligned}$$

再利用$\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r}_0$乘以上式，由于$(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r}_0)^2 = 1$，从而可得：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} &= (\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r}_0)\left[\hat{p}_r + \frac{i}{r}(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{L} + i\hbar)\right] \\ &= (\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r}_0)\hat{p}_r + \frac{i\hbar}{r}(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r}_0)\beta\hat{K} \\ &= \alpha_r\hat{p}_r + \frac{i\hbar}{r}\alpha_r\beta\hat{K}\end{aligned}$$

其中$\alpha_r = \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r}_0$，称为“径向速度”，$\alpha_r$是厄米算符，

$$\hbar\hat{K} = \beta(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{L} + \hbar)$$

满足：

$$\{\alpha_r, \beta\} = \alpha_r\beta + \beta\alpha_r = 0 \qquad\qquad \alpha_r^2 = 1$$

从而哈密顿量在球坐标系中的形式：

$$\hat{H} = c\alpha_r\hat{p}_r + \beta mc^2 + \frac{ic\hbar}{r}\alpha_r\beta\hat{K} + V(r)$$

容易证明$[\hat{H}, \hat{K}] = 0$，同时将轨道角动量换成总角动量可得：

$$\hbar\hat{K} = \beta\left(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{J} - \frac{\hbar}{2}\right)$$

算符$\hat{K}$满足下面的性质：

(1) 对易关系：$[\hat{K}, \hat{\boldsymbol{J}}] = 0$

$$\begin{aligned}
[\hbar\hat{K}, \hat{J}_j] &= [\beta\Sigma_i\hat{L}_i + \hbar\beta, \hat{L}_j + \frac{1}{2}\hbar\Sigma_j] \\
&= \beta\Sigma_i[\hat{L}_i, \hat{L}_j] + \frac{\hbar}{2}\beta[\Sigma_i, \Sigma_j] + \frac{\hbar^2}{2}[\beta, \Sigma] \\
&= i\hbar\,\beta\cdot\Sigma_i\epsilon_{ijk}\hat{L}_k + i\hbar\,\beta\epsilon_{ijk}\Sigma_k\hat{L}_i \\
&= i\hbar\beta\epsilon_{ijk}(\Sigma_i\hat{L}_k + \Sigma_k\hat{L}_i) \\
&= 0
\end{aligned}$$

(2) 对易关系：$[\hat{H}, \hat{K}] = 0$

$$\begin{aligned}
[\hat{H}, \beta\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}] &= [\hat{H}, \beta]\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{J}} + \beta[\hat{H}, \boldsymbol{\Sigma}]\cdot\boldsymbol{J} + \beta\boldsymbol{\Sigma}\cdot[\hat{H}, \hat{\boldsymbol{J}}] \\
&= -2c\beta(\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}) + 2ci\beta(\boldsymbol{\alpha}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\hat{\boldsymbol{J}} + 0
\end{aligned}$$

其中:

$$[\hat{H}, \boldsymbol{\Sigma}] = 2ic(\boldsymbol{\alpha}\times\hat{\boldsymbol{p}})$$

$$[\hat{H}, \beta] = [c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}, \beta] = -2c\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$$

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{B}) &= -\gamma_5(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{B}) \\
&= -\gamma_5\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} + i\boldsymbol{\alpha}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})
\end{aligned}$$

同时注意到$\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}} = 0$, 从而有

$$\begin{aligned}
[\hat{H}, \beta\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}] &= 2c\beta\gamma_5\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{J}} \\
&= 2c\beta\gamma_5\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{L}} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}\right) \\
&= -c\hbar\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \\
&= \frac{\hbar}{2}[\hat{H}, \beta]
\end{aligned}$$

从而

$$[\hat{H}, \hat{K}] = 0$$

从而，$\{\hat{H}, \hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{K}\}$ 构成了一组可观测量的完备集，它们的共同本征态以量子数$|E, j, m_j, K\rangle$来标记。

下面先考虑$\hat{K}$的本征值，利用

$$(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{L}})(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}) = \hat{L}^2 + i\boldsymbol{\Sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{L}}) = \hat{L}^2 - \hbar\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}$$

从而

$$\begin{aligned}
\hbar^2\hat{K}^2 &= \beta(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{L}} + \hbar)\beta(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{L}} + \hbar) \\
&= (\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{L}} + \hbar)^2 \\
&= (\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{L}})^2 + 2\hbar\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{L}} + \hbar^2
\end{aligned}$$

而

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hbar\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{L}} + \frac{3}{4}\hbar^2$$

从而有

$$\hbar^2\hat{K}^2=\hat{J}^2+\frac{1}{4}\hbar^2$$

从而可得

$$K=\pm(j+\frac{1}{2})=\pm1,\pm2,\pm3,\cdots$$

对于给定的j值，K有两个值与之相对应，相当于两种宇称，可以等价于用宇称算符$\hat{P}$来描述。

考虑$\{\hat{J}^2,\hat{J}_z,\hat{K}\}$的共同本征态，设$\Psi^l_{jm}$表示二维自旋表象下$\{\hat{L}^2,\hat{S}^2,\hat{J}^2,\hat{J}_z\}$

$$\Phi^l_{jm}=\begin{cases}\Phi^{(+)}_{jm} & j=l+\frac{1}{2}\\ \\ \Phi^{(-)}_{jm} & j=l-\frac{1}{2}\end{cases}$$

同时可以证明:

$$\Phi^{(\pm)}_{jm}=(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}_0)^2\Phi^{(\pm)}_{jm}$$

由于

$$(\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{L})^2=\boldsymbol{J}^2$$

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+\hbar)\Phi^{(\pm)}_{jm}=\left[\frac{J^2-L^2-S^2}{2}+\hbar\right]\Phi^{(\pm)}_{jm}=\pm\left(j+\frac{1}{2}\right)\hbar\Phi^{(\pm)}_{jm}$$

因为$\hbar\hat{K}=\beta(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{L}+\hbar)$,而$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\sigma} & 0\\ 0 & \boldsymbol{\sigma}\end{bmatrix}$,从而在$\beta=\begin{bmatrix}E & 0\\ 0 & -E\end{bmatrix}$的对角表象(Dirac 表象)中,$\{\hat{K},\hat{J}^2,\hat{J}_z\}$的共同本征态的普遍形式为:

$$\Psi^{(\pm)}=\frac{1}{r}\begin{bmatrix}F(r)\Phi^{(\pm)}_{jm}\\ \\ iG(r)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}_0)\Phi^{(\pm)}_{jm}\end{bmatrix}$$

容易证明:

$$\hbar\hat{K}\Psi^{(\pm)}=\pm\left(j+\frac{1}{2}\right)\hbar\Psi^{(\pm)}$$

如果以$\Phi^{(\pm)}_{jm}$、$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}_0\Phi^{(\pm)}_{jm}$作为新的表象基矢,则有:

$$\Psi=\frac{u}{r}=\frac{1}{r}\begin{bmatrix}F(r)\\ iG(r)\end{bmatrix}$$

在此新表象中有：$\beta=\begin{bmatrix}E & 0\\ 0 & -E\end{bmatrix}$、$\alpha_r=\begin{bmatrix}0 & E\\ E & 0\end{bmatrix}$,同时 Dirac 方程变为：

$$Eu=\left[\frac{\hbar c}{i}\alpha_r\left(\frac{d}{dr}-\frac{K}{r}\beta\right)+\beta mc^2+V(r)\right]u$$

也即：

$$\begin{bmatrix}mc^2+V-E & -\hbar c\left(\frac{d}{dr}+\frac{K}{r}\right)\\ \\ \hbar c\left(\frac{d}{dr}-\frac{K}{r}\right) & -mc^2+V-E\end{bmatrix}\begin{bmatrix}F\\ \\ G\end{bmatrix}=0$$

通过求解这组方程可以用来解决各种中心静电场中的问题，比如在有心力场的束缚态、反常赛曼效应等。对于电子在库仑场中的束缚态，上述方程可以精确求解。

§7 类氢原子

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$

考虑束缚态$E \ll mc^2$，令

$$\alpha_1 = \frac{mc^2 + E}{\hbar c}, \quad \alpha_2 = \frac{mc^2 - E}{\hbar c}, \quad a = \sqrt{\alpha_1 \alpha_2}$$

$$\gamma = \frac{Ze^2}{\hbar c} = Z\alpha \sim \frac{Z}{137}, \quad \rho = \sqrt{\alpha_1 \alpha_2} r = ar$$

从而有：

$$\begin{cases} \left(\frac{\alpha_2}{a} - \frac{\gamma}{\rho}\right) F - \left(\frac{\kappa}{\rho} + \frac{d}{d\rho}\right) G = 0 \\ \left(\frac{\kappa}{\rho} - \frac{d}{d\rho}\right) F + \left(\frac{\alpha_2}{a} + \frac{\gamma}{\rho}\right) G = 0 \end{cases}$$