§ 33. Разложение по степеням $1/c$ [1])

Мы видели (см. § 21), что в нерелятивистском пределе ($v \to 0$) две компоненты (χ) биспинора $\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ обращаются в нуль. Поэтому при малых скоростях электрона $\chi \ll \varphi$. Это дает возможность получить приближенное уравнение, содержащее только двухкомпонентную величину φ, путем формального разложения волновой функции по степеням $1/c$.

Исходим из уравнения Дирака для электрона во внешнем поле в виде

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left\{ c\alpha \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + \beta mc^2 + e\Phi \right\} \psi. \tag{33,1}$$

В релятивистской энергии частицы содержится также и ее энергия покоя mc^2. Для перехода к нерелятивистскому приближению она должна быть исключена, для чего вместо ψ вводим функцию ψ' согласно

$$\psi = \psi' e^{-imc^2 t/\hbar}.$$

Тогда

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + mc^2 \right) \psi' = \left\{ c\alpha \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + \beta mc^2 + e\Phi \right\} \psi'.$$

Представив ψ' в виде $\psi' = \begin{pmatrix} \varphi' \\ \chi' \end{pmatrix}$, получим систему уравнений

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \right) \varphi' = c\sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \chi', \tag{33,2}$$

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi + 2mc^2 \right) \chi' = c\sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi' \tag{33,3}$$

(ниже будем опускать штрихи у φ и χ, что не вызовет недоразумений, так как в этом параграфе мы пользуемся только преобразованной функцией ψ').

В первом приближении в левой стороне уравнения (33,3) оставляем лишь член $2mc^2\chi$ и получаем

$$\chi = \frac{1}{2mc} \sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi \tag{33,4}$$

(отметим, что $\chi \sim \varphi/c$). Подстановка этого выражения в (33,2) дает

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \right) \varphi = \frac{1}{2m} \left(\sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right)^2 \varphi.$$

Для матриц Паули справедливо соотношение

$$(\sigma \mathbf{a})(\sigma \mathbf{b}) = \mathbf{ab} + i\sigma [\mathbf{ab}], \tag{33,5}$$

[1]) В этом параграфе пользуемся обычной системой единиц.

где $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ — произвольные векторы (см. (20,9)). В данном случае $\mathbf{a}=\mathbf{b}=\hat{\mathbf{p}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}$, но векторное произведение $[\mathbf{ab}]$ не обращается в нуль в силу некоммутативности $\hat{\mathbf{p}}$ и $\mathbf{A}$:

$$\left[\left(\hat{\mathbf{p}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\left(\hat{\mathbf{p}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right]\varphi=i\frac{e\hbar}{c}\{[\mathbf{A}\nabla]+[\nabla\mathbf{A}]\}\varphi=i\frac{e\hbar}{c}\operatorname{rot}\mathbf{A}\cdot\varphi.$$

Таким образом,

$$\left(\sigma\left(\hat{\mathbf{p}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right)^2=\left(\hat{\mathbf{p}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2-\frac{e\hbar}{c}\sigma\mathbf{H} \qquad (33,6)$$

(где $\mathbf{H}=\operatorname{rot}\mathbf{A}$ — магнитное поле), и для φ получается уравнение

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}=\hat{H}\varphi=\left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2+e\Phi-\frac{e\hbar}{2mc}\sigma\mathbf{H}\right]\varphi. \qquad (33,7)$$

Это — так называемое *уравнение Паули*. Оно отличается от нерелятивистского уравнения Шредингера наличием в гамильтониане последнего члена, который имеет вид потенциальной энергии магнитного диполя во внешнем поле (ср. III, § 111). Таким образом, в первом (по $1/c$) приближении электрон ведет себя как частица, обладающая наряду с зарядом также и магнитным моментом:

$$\mu=\frac{e}{mc}\hbar\mathbf{s}. \qquad (33,8)$$

При этом гиромагнитное отношение (e/mc) двое больше, чем это было бы для магнитного момента, связанного с орбитальным движением[1]).

Плотность $\rho=\psi^*\psi=\varphi^*\varphi+\chi^*\chi$. В первом приближении второй член должен быть отброшен, так что $\rho=|\varphi|^2$, как и должно быть для шредингеровского уравнения.

Плотность же тока:

$$\mathbf{j}=c\psi^*\alpha\psi=c(\varphi^*\sigma\chi+\chi^*\sigma\varphi).$$

Согласно (33,4) подставляем сюда

$$\chi=\frac{1}{2mc}\sigma\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi, \qquad \chi^*=\frac{1}{2mc}\left(i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi^*\sigma,$$

а произведения, содержащие по два множителя σ, преобразуются с помощью формулы (33,5), представленной в виде

$$(\sigma\mathbf{a})\sigma=\mathbf{a}+i[\sigma\mathbf{a}], \qquad \sigma(\sigma\mathbf{a})=\mathbf{a}+i[\mathbf{a}\sigma]. \qquad (33,9)$$

[1]) Этот замечательный результат был получен *Дираком* в 1928 г. Двухкомпонентная волновая функция, удовлетворяющая уравнению (33,7), была введена *Паули* (1927) еще до открытия Дираком его уравнения.

В результате получается

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\varphi\nabla\varphi^* - \varphi^*\nabla\varphi) - \frac{e}{mc}\mathbf{A}\varphi^*\varphi + \frac{\hbar}{2m}\operatorname{rot}(\varphi^*\boldsymbol{\sigma}\varphi), \qquad (33,10)$$

в согласии с выражением III (115,4) из нерелятивистской теории.

Найдем теперь второе приближение, продолжив разложение до членов $\sim 1/c^2$ [1]). Будем предполагать при этом, что имеется только электрическое внешнее поле ($\mathbf{A} = 0$).

Прежде всего замечаем, что с учетом членов $\sim 1/c^2$ плотность

$$\rho = |\varphi|^2 + |\chi|^2 = |\varphi|^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}|\boldsymbol{\sigma}\nabla\varphi|^2.$$

Это выражение отличается от шредингеровского. Имея в виду найти (во втором приближении) волновое уравнение, аналогичное уравнению Шредингера, мы должны ввести вместо φ другую (двухкомпонентную) функцию $\varphi_{\text{шр}}$, для которой сохраняющийся во времени интеграл имел бы вид $\int|\varphi_{\text{шр}}|^2 d^3x$, как это должно быть для уравнения Шредингера.

Для нахождения требуемого преобразования пишем условие

$$\int \varphi^*_{\text{шр}}\varphi_{\text{шр}}\, d^3x = \int\left\{\varphi^*\varphi + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}(\nabla\varphi^*\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{\sigma}\nabla\varphi)\right\} d^3x$$

и производим интегрирование по частям:

$$\int(\nabla\varphi^*\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{\sigma}\nabla\varphi)\, d^3x = -\int\varphi^*(\boldsymbol{\sigma}\nabla)(\boldsymbol{\sigma}\nabla)\varphi\, d^3x = -\int\varphi^*\Delta\varphi\, d^3x$$

(или то же с переставленными φ и φ^*). Таким образом,

$$\int \varphi^*_{\text{шр}}\varphi_{\text{шр}}\, d^3x = \int\left\{\varphi^*\varphi - \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}(\varphi^*\Delta\varphi + \varphi\Delta\varphi^*)\right\} d^3x,$$

откуда видно, что

$$\varphi_{\text{шр}} = \left(1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2}\right)\varphi, \qquad \varphi = \left(1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2}\right)\varphi_{\text{шр}}. \qquad (33,11)$$

Для упрощения записи будем считать, что состояние стационарно, т. е. заменим оператор $i\hbar\,\partial/\partial t$ энергией ε (с вычтенной энергией покоя). В следующем (после (33,4)) приближении имеем из (33,3):

$$\chi = \frac{1}{2mc}\left(1 - \frac{\varepsilon - e\Phi}{2mc^2}\right)(\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{p}})\varphi.$$

Это выражение надо подставить в (33,2), после чего заменить φ на $\varphi_{\text{шр}}$ согласно (33,11), опуская все время члены более высо-

[1]) Ниже следуем методу *В. Б. Берестецкого* и *Л. Д. Ландау* (1949).

кого порядка, чем $1/c^2$. После простого вычисления получим уравнение для $\varphi_{шр}$ в виде $\varepsilon\varphi_{шр} = \hat{H}\varphi_{шр}$, где гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + e\Phi - \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2} + \frac{e}{4m^2c^2}\left\{(\sigma\hat{\mathbf{p}})\,\Phi\,(\sigma\hat{\mathbf{p}}) - \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{p}}^2\Phi + \Phi\hat{\mathbf{p}}^2)\right\}.$$

Выражение в фигурных скобках преобразуется с помощью формул

$$(\sigma\hat{\mathbf{p}})\,\Phi\,(\sigma\hat{\mathbf{p}}) = \Phi\hat{\mathbf{p}}^2 + (\sigma\hat{\mathbf{p}}\Phi)(\sigma\hat{\mathbf{p}}) = \Phi\hat{\mathbf{p}}^2 + i\hbar(\sigma\mathbf{E})(\sigma\hat{\mathbf{p}}),$$

$$\hat{\mathbf{p}}^2\Phi - \Phi\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2\Delta\Phi + 2i\hbar\mathbf{E}\hat{\mathbf{p}},$$

где $\mathbf{E} = -\nabla\Phi$ — электрическое поле. Окончательное выражение для гамильтониана:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + e\Phi - \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2} - \frac{e\hbar}{4m^2c^2}\,\sigma\,[\mathbf{E}\hat{\mathbf{p}}] - \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\,\mathrm{div}\,\mathbf{E}. \qquad (33,12)$$

Последние три члена—искомые поправки порядка $1/c^2$. Первый из них — следствие релятивистской зависимости кинетической энергии от импульса (разложение разности $c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2c^2} - mc^2$). Второй член, который может быть назван энергией *спин-орбитального взаимодействия*, — энергия взаимодействия движущегося магнитного момента с электрическим полем [1]). Последний же член отличен от нуля только в тех точках, где находятся заряды, создающие внешнее поле; так, для кулонова поля точечного заряда Ze: $\Delta\Phi = -4\pi Ze\delta(\mathbf{r})$ (*C. G. Darwin*, 1928).

Если электрическое поле центрально-симметрично, то

$$\mathbf{E} = -\frac{\mathbf{r}}{r}\frac{d\Phi}{dr}$$

и оператор спин-орбитального взаимодействия можно представить в виде

$$\frac{e\hbar}{4m^2c^2r}\,\sigma\,[\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}]\,\frac{d\Phi}{dr} = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2r}\frac{dU}{dr}\,\hat{\mathbf{l}}\hat{\mathbf{s}}. \qquad (33,13)$$

Здесь $\hat{\mathbf{l}}$ — оператор орбитального момента, $\hat{\mathbf{s}} = {}^1/_2\sigma$ — оператор спина электрона, $U = e\Phi$ — потенциальная энергия электрона в поле.

---

[1]) Введя магнитный момент (33,8) и скорость $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$, получим эту энергию в виде $-\frac{1}{2c}\,\mu\,[\mathbf{E}\mathbf{v}]$. На первый взгляд этот результат может показаться неестественным, так как при переходе в систему отсчета, движущуюся вместе с частицей, возникает магнитное поле $\mathbf{H} = \frac{1}{c}[\mathbf{E}\mathbf{v}]$, в котором магнитный момент должен был бы иметь энергию $-\mu\mathbf{H}$. В действительности появление множителя $^1/_2$ («томасовская половинка», *L. Thomas*, 1926) связано с общими требованиями релятивистской инвариантности в сочетании со специфическими свойствами электрона как «спинорной» частицы с присущим ей значением гиромагнитного отношения (см. § 41).