

моментом (взаимодействие —  $\mu\mathcal{H}$ , спин-орбитальное взаимодействие) и распределенной плотностью заряда (дарвиновское слагаемое).

Наконец, следует отметить, что использование нерелятивистского приближения для потенциалов, которые сингулярны в начале координат, таких как  $A = M \times r/r^3$  или  $\phi = -Ze/r$ , не обосновано, поскольку в окрестности точки  $r = 0$  изменение величин  $eA/m$  и  $e\phi/m$  не мало. Если воспользоваться описанным выше методом последовательных приближений достаточное число раз, то в нерелятивистском гамильтониане появятся слагаемые, которые будут иметь достаточно сильную сингулярность в начале координат и будут давать бесконечный вклад в энергию. Пути преодоления этой трудности уже были предложены в предыдущих обсуждениях. В нерелятивистском гамильтониане величины  $A$  и  $\phi$  заменяются их средними значениями по области с линейными размерами порядка  $\hbar/mc$ . Если нерелятивистское приближение является обоснованным, то это ведет к эффективному обрезанию сингулярностей на расстоянии  $\hbar/mc$  от начала координат во всех сингулярных выражениях, которые возникают при вычислениях. Для того чтобы нерелятивистское приближение было обоснованным в упомянутых выше двух случаях, достаточно чтобы в точке  $r = \hbar/mc$  выполнялись неравенства<sup>1)</sup>

$$e|A| \ll mc^2, \quad e\phi \ll mc^2.$$

## Раздел VI. РЕШЕНИЯ С ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ ЭНЕРГИЕЙ И ТЕОРИЯ ПОЗИТРОНОВ

Θαλασσα! Θαλασσα! \*)  
(Anabasis, IV. 8)

### § 36. Свойства зарядово-сопряженных решений

В дальнейшем мы будем использовать понятие зарядового сопряжения, которое было введено в § 19. Зарядовое сопряжение представляет собой антилинейное взаимнооднозначное соответствие между волновыми функциями, которые описывают поведение двух различных частиц с одной и той же массой  $m$ , но с противоположными зарядами  $+e$  и  $-e$  в заданном электромагнитном поле ( $A$ ,  $\phi$ ).

Если физическая величина, связанная с первой частицей, представлена наблюдаемой  $Q(e)$ , то для второй частицы та же

<sup>1)</sup> Если  $m_N$  — масса атомного ядра, то  $|M| \approx Ze\hbar/m_Nc$ ; величина  $eA/mc^2$  в точке  $r = \hbar/mc$  имеет порядок  $(e^2/\hbar c)(Zm/m_N)$ , т. е.  $10^{-5}\text{--}10^{-6}$ . Таким образом, наши вычисления сверхтонкой структуры полностью обоснованы. Что касается примера из § 34, то величина  $e\phi/mc^2$  имеет порядок  $e^2Z/\hbar c$  и вычисления являются обоснованными, если  $Z \ll 137$ .

<sup>\*)</sup> *Mopel Mopel* (греч., прим. перев.).

самая величина представляется наблюдаемой  $Q(-e)$ . Так, в обоих случаях для импульса имеем  $p \equiv -i\nabla$ , а для оператора энергии в первом случае имеем

$$H(e) \equiv a(p - eA) + \beta m + e\varphi,$$

а во втором случае

$$H(-e) \equiv a(p + eA) + \beta m - e\varphi.$$

Рассмотрим решение  $\Psi(r, t)$  и зарядово-сопряженное решение  $\Psi^c(r, t)$ . Мы хотим сравнить физические характеристики состояний, которые описываются этими решениями. Если  $K_c$  — антилинейный оператор, определенный равенством (124), то

$$\Psi^c = K_c \Psi. \quad (203)$$

Пусть  $\langle Q \rangle$  обозначает среднее значение  $Q$  в состоянии  $\Psi$ , а  $\langle Q \rangle_c$  — среднее значение того же оператора в состоянии  $\Psi^c$ . Предполагая, что состояния  $\Psi$  и  $\Psi^c$  нормированы на единицу, имеем

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle &= \langle \Psi | Q | \Psi \rangle, \\ \langle Q \rangle_c &= \langle \Psi^c | Q | \Psi^c \rangle. \end{aligned}$$

Из соотношения (203) получаем

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle_c &= (\langle \Psi | K_c^\dagger (Q K_c) | \Psi \rangle) = \\ &= \langle \Psi | (K_c^\dagger Q K_c) | \Psi \rangle^* = \langle \Psi | (K_c^\dagger Q^\dagger K_c) | \Psi \rangle, \end{aligned}$$

откуда следует соотношение для средних значений

$$\langle Q \rangle_c = \langle (K_c^\dagger Q^\dagger K_c) \rangle. \quad (204)$$

Используя это соотношение и свойства антиунитарного преобразования  $K_c$ , находим следующие соотношения для средних значений в состоянии  $\Psi$  и в зарядово-сопряженном состоянии:

$$\begin{aligned} \langle \beta \rangle_c &= -\langle \beta \rangle, & \langle a \rangle_c &= \langle a \rangle, & \langle \sigma \rangle_c &= -\langle \sigma \rangle, \\ \langle r \rangle_c &= \langle r \rangle, & \langle p \rangle_c &= -\langle p \rangle, & \langle L \rangle_c &= -\langle L \rangle, \quad (205) \\ \langle P(r_0) \rangle_c &= \langle P(r_0) \rangle, & \langle j(r_0) \rangle_c &= \langle j(r_0) \rangle, & \langle J \rangle_c &= -\langle J \rangle, \\ \langle H(-e) \rangle_c &= -\langle H(e) \rangle. \end{aligned}$$

Мы видим, что зарядово-сопряженные решения имеют совпадающие плотности вероятности и плотности потока, — таким образом, противоположные плотности зарядов и электрических токов — но противоположные по знаку энергии: зарядовое сопряжение меняет знак энергии.

### § 37. Особое поведение решений с отрицательной энергией

После этих предварительных замечаний мы можем перейти к более подробному обсуждению вопроса о состояниях с отрицательной энергией.

Вначале рассмотрим случай свободной частицы. Решения уравнения Дирака в этом случае были получены в § 23. Спектр энергии состоит из двух полупрямых  $(-\infty, -mc^2)$  и  $(mc^2, +\infty)$ , разделенных интервалом длиной  $2mc^2$  (см. рис. 22, a). Первая часть спектра отвечает состояниям с отрицательной энергией:  $E = -E_p = -\sqrt{m^2 + p^2}$ , а вторая часть — состояниям с положительной энергией.

Исследуем движение свободного волнового пакета. Мы покажем, что, вообще говоря, центр волнового пакета только в среднем движется по классической траектории. Для этого проинтегрируем уравнения движения в представлении Гейзенberга, которые в данном случае имеют вид

$$dr/dt = i[H, r] = a, \quad (206)$$

$$da/dt = i[H, a] = i(Ha + aH) - 2iaH = 2ip - 2iaH. \quad (207)$$

Поскольку  $p$  и  $H$  не зависят от времени, уравнение (207) легко интегрируется

$$a(t) = \left( a(0) - \frac{p}{H} \right) e^{-2iHt} + \frac{p}{H}.$$

Таким образом, получена явная зависимость  $dr/dt$  от времени  $t$ , и уравнение (206) тоже легко интегрируется

$$r(t) = r(0) + \frac{p}{H} t + i \left( a(0) - \frac{p}{H} \right) \frac{e^{-2iHt}}{2H}. \quad (208)$$

Формула (208) определяет оператор  $r$  в представлении Гейзенберга в момент времени  $t$  как функцию от значений, которые принимают операторы  $r$  и  $a$  в начальный момент времени  $t=0$ . Отсюда мы можем получить закон движения центра  $\langle r \rangle$  любого волнового пакета, который поучительно сравнить с классическим законом

$$r_{\text{кл.}}(t) = r(0)_{\text{кл.}} + \left( \frac{p}{H} \right)_{\text{кл.}} t.$$

В отличие от классического равномерного прямолинейного движения свободный волновой пакет испытывает сложное движение — результат сложения равномерного прямолинейного движения со скоростью  $\langle p/H \rangle$  и быстрых осцилляций

$$\left\langle i \left( a(0) - \frac{p}{H} \right) \frac{e^{-2iHt}}{2H} \right\rangle.$$

Амплитуда и период этих осцилляций («Zitterbewegung» — дрожание) имеют порядок  $\hbar/2mc$  и  $\hbar/2mc^2$  соответственно.

Таких осцилляций не возникает, если пакет представляет собой суперпозицию волн только с положительной энергией или только с отрицательной. Чтобы убедиться в этом, достаточно показать, что

$$\Gamma_{\pm} \left( \alpha - \frac{p}{H} \right) \frac{e^{-2iHt}}{2H} \Gamma_{\pm} = 0,$$

где  $\Gamma_+$  и  $\Gamma_-$  — проекторы на состояния с положительной и отрицательной энергией соответственно (определение (195)). Последовательно находим

$$[H, \alpha] = 2p - 2\alpha H,$$

$$[\Gamma_{\pm}, \alpha] = \pm \frac{p}{E_p} \mp \alpha \frac{H}{E_p}.$$

И, поскольку  $H\Gamma_{\pm} = \pm E_p \Gamma_{\pm}$ , то получаем

$$0 \equiv \Gamma_{\pm} [\Gamma_{\pm}, \alpha] \Gamma_{\pm} = \Gamma_{\pm} \left( \frac{p}{H} - \alpha \right) \Gamma_{\pm}.$$

Откуда мы получаем упомянутое выше свойство, используя дополнительно коммутативность  $H$  и  $\Gamma_+$ ,  $\Gamma_-$ . Следовательно, быстрые осцилляции связаны с интерференцией компонент волнового пакета с положительной и отрицательной энергией.

Собственно «дрожание», являясь любопытным эффектом, не представляет какой-либо трудности для теории. Трудность возникает, когда исследуется движение волнового пакета, построенного только из состояний с отрицательной энергией. В этом случае «дрожание» исчезает и центр пакета движется равномерно и прямолинейно со скоростью

$$v = \left\langle \frac{p}{H} \right\rangle = - \left\langle \frac{p}{E_p} \right\rangle,$$

которая противоположна по направлению импульсу пакета  $\langle p \rangle$ . В частности, в нерелятивистском пределе ( $H \approx -mc^2$ ) получаем соотношение  $v = -\langle p \rangle/m$ , т. е. частица ведет себя так, как если бы она имела отрицательную массу.

Трудность такого рода становится еще более очевидной при исследовании движения волнового пакета в статическом поле.

Рассмотрим, например, электрон в кулоновском потенциале притяжения  $-Ze^2/r$ . Спектр состоит из непрерывной части положительных энергий от  $mc^2$  до  $\infty$ , серии дискретных уровней положительных энергий, меньших  $mc^2$ , и непрерывной части отрицательных энергий от  $-mc^2$  до  $-\infty$  (см. рис. 22, б). Напомним, что состояния с отрицательной энергией соответствуют при зарядовом сопряжении состояниям частицы с той же мас-

сой, но с противоположным зарядом (т. е. состоянием позитрона), которая находится в том же потенциале. Можно сказать и иначе, что состояния с отрицательной энергией соответствуют состояниям электрона в потенциале  $Ze^2/r$ . При этом соответствие меняет знак энергия и переставляются большие и малые компоненты, а плотность потока и плотность остаются теми же (см. ур. (205)). Спектр электрона в потенциале отталкивания

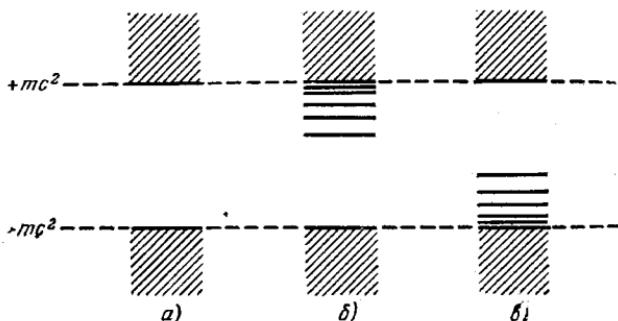


Рис. 22. Спектр энергий электрона Дирака: а) свободного; б) в потенциале притяжения  $-Ze^2/r$ ; в) в потенциале отталкивания  $Ze^2/r$ .

$Ze^2/r$  изображен на рис. 22, в. Непрерывная часть положительных энергий в потенциале отталкивания соответствует непрерывной части отрицательных энергий в потенциале притяжения.

Рассмотрим движение волнового пакета из состояний с отрицательной энергией в потенциале  $-Ze^2/r$ , предполагая, что справедливо нерелятивистское приближение ( $Ze^2 \ll 1$ , энергии порядка  $-mc^2$ ). Движение будет тем же, что и для пакета волн с положительной энергией, получающегося зарядовым сопряжением. В пределе очень малых скоростей можно использовать классическое приближение (см. § VI. 5), и движение центра пакета будет почти совпадать с движением классического электрона, т. е. с движением частицы отрицательной массы  $-m$  в потенциале  $-Ze^2/r$ . Направление скорости противоположно импульсу, а направление ускорения противоположно направлению силы. Такие явления никогда не наблюдались в экспериментах.

### § 38. Изменение интерпретации состояний с отрицательной энергией. Теория дырок и позитронов

В приведенной выше формулировке состояния с отрицательной энергией не имеют никакого физического смысла. Если бы было возможно полностью устраниТЬ взаимодействие между со-

стояниями с положительной и отрицательной энергией, то последние можно было совсем не учитывать. Однако поступить так не удается.

Рассмотрим, например, свободный электрон в состоянии с положительной энергией  $E_+$  и подвергнем его в течение времени от 0 до  $t$  действию электромагнитного излучения частоты  $\omega$ . Если интервал времени достаточно велик, а напряженность поля не слишком большая, то вычислить результирующий эффект можно, используя методы § XVII. 6. Таким образом, мы получим отличную от нуля вероятность перехода электрона в состояния с энергией  $E_+ + \hbar\omega$  и  $E_+ - \hbar\omega$ . В частности, если  $\hbar\omega > (E_+ + mc^2)$ , то второй переход совершается в состояния с отрицательной энергией.

В качестве другого примера рассмотрим полный спектр атома водорода (рис. 22, б). В результате взаимодействия электрона с электромагнитным полем всегда существует вероятность радиационного перехода из данного состояния атома в состояние с более низкой энергией. Следовательно, электрон, который находится в одном из связанных состояний атома водорода, даже в случае изолированной системы, может совершить квантовый переход в состояния с отрицательной энергией, излучив один или несколько фотонов. Более того, поскольку спектр энергий не ограничен снизу, атом водорода не имеет устойчивых состояний<sup>1)</sup>.

Чтобы обойти эти трудности, Дирак сделал следующее предположение. В состоянии, которое мы называем «вакуумом», все состояния отрицательной энергии заняты электронами. Если к такому «вакууму» добавить один электрон, то, поскольку все состояния отрицательной энергии заняты, а электроны подчиняются статистике Ферми — Дирака, этот электрон может находиться только в состояниях с положительной энергией.

Таким образом, «вакуум» представляет собой полностью вырожденный ферми-газ бесконечной плотности. Кроме этого, предполагается, что этот газ совершенно ненаблюдаем и не приводит к каким-либо гравитационным или электромагнитным эффектам. Наблюдаемые физические характеристики данного состояния будут определяться отклонениями этого состояния от такого «вакуума». Так, наблюдаемый заряд системы (электрон + «вакуум») равен разности полных зарядов системы и «вакуума», т. е. заряду электрона. Точно так же наблюдаемая энергия системы равна разности полных энергий системы и «вакуума» и, следовательно, — энергии добавленного электрона.

<sup>1)</sup> О. Клейн сформулировал знаменитый парадокс, из которого также видно, что вероятность перехода в состояния с отрицательной энергией не равна нулю. Парадокс Клейна излагается во многих книгах, см., например, *M. Борн, loc. cit.* (прим. 2, гл. I).

Тем самым, переопределение наблюдаемых величин до сих пор сводилось к тому, что оказались запрещенными переходы в состояние с отрицательными энергиями<sup>1)</sup>.

Рассмотрим теперь, что будет наблюдаваться, если из «моря» отрицательных энергий удалить электрон. Согласно сформулированным выше правилам можно заключить, что возникшая «дырка» будет иметь заряд, противоположный заряду электрона. Кроме этого, ее энергия будет иметь противоположный знак, т. е. будет положительной, а импульс — противоположное направление. Эти утверждения справедливы независимо от того, находится или нет удаленный электрон в собственном состоянии гамильтонiana. В частности, если этот электрон описывается волновым пакетом, движущимся со скоростью  $v$ , то дырка движется с той же скоростью, но с противоположным импульсом: дырка ведет себя, как частица положительной массы  $+m$  и заряда  $-e$ . Такие частицы наблюдаются в природе, их называют *позитронами*.

Под действием электромагнитного поля или других подходящих возмущений электрон из «моря» отрицательных энергий может совершить квантовый переход в состояние с положительной энергией. Дырка в «море» отрицательных энергий будет вести себя, как позитрон. Таким образом, появляется пара частиц с противоположными зарядами. Рождение электрон-позитронных пар наблюдается экспериментально.

Точно так же, если в море отрицательных энергий имеется дырка, то электрон с положительной энергией может совершить переход в незанятое состояние с отрицательной энергией с испусканием фотонов. Такое явление аннигиляции электрон-позитронных пар с излучением фотонов также наблюдается экспериментально.

### § 39. Трудности теории дырок

Теория дырок, которая была кратко сформулирована выше, позволяет примирить теорию Дирака с такими экспериментальными фактами, как отсутствие состояний с отрицательными энергиями, существование позитронов, рождение и аннигиляция пар. В этом отношении она представляет собой значительный шаг вперед, однако в ней встречаются серьезные трудности и ограничения.

Прежде всего, теория не является полной. Постулируя занятость всех состояний с отрицательной энергией, мы уже *не имеем одиночественной теории* даже при описании одного электрона. Построенный в этой главе формализм теории Дирака

<sup>1)</sup> В частности, автоматически исчезает осцилляторное движение (*Zitterbewegung*).

для одной частицы недостаточен для описания такой ситуации, и можно надеяться получить самосогласованное описание только в рамках теории поля.

Теория дырок представляет собой лишь первый шаг в построении корректной теории квантового электронного поля. Ее преимущество состоит в том, что она рисует нам простые картины физических явлений и служит, таким образом, подспорьем при разработке последовательной теории. Однако как только мы пожелаем извлечь из нее нечто большее, нас встречают ловушки и противоречия.

Например, непоследовательно считать, что «вакуум» содержит бесконечное число электронов, и предполагать, что эти электроны не взаимодействуют между собой.

Другим слабым местом теории является явная несимметрия между электронами и позитронами. Можно сформулировать зарядово-сопряженную теорию, в которой позитроны будут играть роль частиц, а электроны — роль дырок, все физические следствия при этом не изменятся. Устранить все эти трудности можно в формализме теории поля, который использует уравнения, инвариантные относительно зарядового сопряжения.

Отметим, наконец, что даже определение состояний отрицательной энергии зависит от приложенного электромагнитного потенциала. В двух случаях, рассмотренных в § 37, свободной частицы и частицы в кулоновском поле, пространства состояний отрицательной энергии не совпадают. Если, например, волновую функцию основного состояния атома водорода разложить по плоским волнам, то плоские волны с отрицательной энергией дадут в это разложение хотя и малый, но не исчезающий вклад. В приведенном выше определении «вакуума», под состояниями с отрицательной энергией понимались состояния свободной частицы (действительно, вакуум естественно определять в отсутствие внешнего поля). Введение электромагнитного поля модифицирует вакуумное состояние за счет рождения пар. В результате возникает нечто вроде поляризуемой среды и величина электрического заряда в «вакууме» кажется меньше своего настоящего значения. Такие же эффекты возникают и в теории поля. Теория дырок позволяет предсказать эти эффекты, однако не в состоянии дать надежного и самосогласованного метода вычисления этих эффектов.

### ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

- Показать, что если  $\Psi$  удовлетворяет уравнению Клейна — Гордона с потенциалом  $A^\mu$ , то уравнению непрерывности удовлетворяет следующий 4-ток:  

$$J^\mu = \frac{i}{2m} [\Psi^* (D^\mu \Psi) - \Psi (D^\mu \Psi)^*] = \frac{i}{2m} [\Psi^* (\partial^\mu \Psi) - \Psi (\partial^\mu \Psi^*)] - \frac{e}{m} A^\mu \Psi^* \Psi$$
 (см. задачу IV. 1).

2. Рассмотрим атом водорода, в котором электрон заменен частицей с теми же массой и зарядом, но волновая функция которой удовлетворяет уравнению Клейна—Гордона. Тогда уровни дискретного спектра определяются уравнением на собственные значения

$$\left[ -\Delta + m^2 - \left( E + \frac{e^2}{r} \right)^2 \right] \Psi(r) = 0.$$

Показать, что это уравнение можно решить точно, разделяя угловые и радиальную переменные, и что зависимость уровней дискретного спектра от квантовых чисел  $n$  и  $l$  дается формулой

$$E^{nl} = m \left( 1 + \frac{e^4}{(n - \epsilon_l)^2} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad \epsilon_l = l + \frac{1}{2} - \left[ \left( l + \frac{1}{2} \right)^2 - e^4 \right]^{\frac{1}{2}} \\ (n = 1, 2, \dots, \infty; l = 0, 1, \dots, n - 1).$$

Сравнить этот спектр с тем, который получается в нерелятивистской теории Шредингера.

3. Показать, что все приведенные в табл. II (§ 10) матрицы  $\gamma^A$  (не обязательно унитарные) имеют определитель, равный 1.

4. Пусть  $B$  — определенная в конце § 10 матрица. Доказать, что  $BB^* = B^*B = -I$ . (Показать сначала, что

(i) матрица  $BB^*$  кратна единичной и, следовательно,  $BB^* = B^*B = \pm I$ ;

(ii) матрица  $BB^*$  не зависит от выбора 4 унитарных матриц  $\gamma^\mu$ , которые участвуют в определении  $B$ .)

5. Вывести следующие свойства (антиунитарного) оператора зарядового сопряжения  $K_C$ , введенного в § 19:

$$K_C p_\mu K_C^\dagger = -p_\mu, \quad K_C J_{\alpha\beta} K_C^\dagger = -J_{\alpha\beta}$$

$$K_C P K_C^\dagger = -P, \quad K_C K_T K_C^\dagger = -K_T.$$

Показать, что, если выбрать фазы операторов преобразования так, как это сделано в § 17, то  $K_C$  коммутирует с операторами трансляций и собственных преобразований Лоренца и антикоммутирует с пространственным отражением и обращением времени. Как следует изменить выбор фаз, чтобы  $K_C$  коммутировал со всеми операторами этих преобразований?

6. Используя гамильтониан Дирака, получить уравнения движения для операторов  $r$  и  $\pi$  в гейзенберговском представлении. Аналогичным образом вывести уравнения

$$\frac{d}{dt} \left[ (r \times \pi) + \frac{1}{2} \sigma \right] = r \times F, \quad \frac{dM}{dt} = (\alpha, F) = e(\alpha, \mathcal{E}),$$

где  $F$  — «сила Лоренца»:  $F = e(\mathcal{E} + \alpha \times \mathcal{H})$ . Сравнить эти уравнения с уравнениями (22) и (21') классической динамики.

7. В случае свободного уравнения Дирака любое его решение удовлетворяет уравнению Клейна—Гордона. Показать, что обратное не верно (привести контрпример).

8. Доказать тождество (169).

9. Разложить плосковолновое решение уравнения Дирака с импульсом  $p$ , направленным по оси  $z$ , по сферическим волнам.

10. Провести систематическое исследование таких волновых функций атома водорода, для которых радиальные функции  $F$  и  $G$  пропорциональны друг другу. Показать, что соответствующие уровни отвечают  $n' = 0$  (следовательно,  $J = n - \frac{1}{2}$ ) и  $l = n - 1$ . Ответ (обозначения § 27):

$$E_{n, n-\frac{1}{2}} = m \left(1 - \frac{e^4}{n^2}\right)^{\frac{1}{2}},$$

$$F = \text{const} \cdot \rho^s e^{-\rho}, \quad G = -vF,$$

$$s = \sqrt{n^2 - e^4}, \quad \kappa = me^2/n, \quad \rho = \kappa r, \quad v = \kappa/(E + m) \approx e^2/2n.$$

11. Используя предложенный в § 27 метод, вычислить уровни атома водорода в теории Дирака.

12. Сравнить тонкую структуру уровней атома водорода, которая получается в теории Дирака и в теории Клейна — Гордона для частицы с одной и той же массой и зарядом в заданном кулоновском поле (см. задачу 2).

13. Исходя из выражения (202), вычислить релятивистские поправки порядка  $v^2/c^2$  к уровням  $2s_{\frac{1}{2}}$ ,  $2p_{\frac{1}{2}}$  и  $2p_{\frac{3}{2}}$  атома водорода. Показать, что в этом приближении уровни  $2s_{\frac{1}{2}}$  и  $2p_{\frac{1}{2}}$  не меняются и сравнить это с точным результатом из § 27.