

ОТВЕТЫ на вопросы ТЕОРЕТИЧЕСКОГО МИНИМУМА по КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ (6 семестр)

1. Собственные значения и собственные векторы наблюдаемых, их основные свойства. Измерения в квантовой теории. Полный набор наблюдаемых.

В квантовой теории наблюдаемым ставятся в соответствие эрмитовы операторы в гильбертовом пространстве чистых состояний квантовой системы. При этом измерение интерпретируется как такое взаимодействие квантовой системы с измерительным прибором, в результате которого она переходит в состояние, описываемое Собственным Вектором наблюдаемой. Результатом измерения является Собственное Значение.

Определение: Если существуют такие значения числа f , при которых уравнение

$$\hat{F}|\psi\rangle = f|\psi\rangle$$

имеет нетривиальные решения, то они называются СЗ оператора F , а эти решения называются СВ этого оператора, соответствующими этим СЗ.

Основные свойства:

- все СЗ эрмитова оператора вещественны
- СВ эрмитова оператора, отвечающие разным СЗ, ортогональны
- два эрмитовых оператора имеют общую полную систему СВ тогда и только тогда, когда они коммутируют
- в H существует ПОБ, составленный из СВ любого эрмитова оператора с чисто дискретным спектром. В случае непрерывного спектра можно построить расширение пространства, в котором такой базис тоже будет существовать.

Максимально широкий набор попарно коммутирующих независимых наблюдаемых называется Полным Набором Наблюдаемых для данной системы. Количество операторов в ПНН – число степеней свободы системы. Каждому набору СЗ операторов ПНН отвечает один и только один (с точностью до фазового множителя) их общий нормированный СВ.

2. Принцип соответствия. Каноническое коммутационное соотношение. Соотношения неопределенностей для некоммутирующих наблюдаемых.

Операторы наблюдаемых, имеющих классический аналог, могут быть построены по принципу соответствия:

$$\hat{F} \equiv F_{\text{класс}}(\hat{x}_i, \hat{p}_j, t)$$

причем операторы координат и импульсов должны быть определены как эрмитовы линейные операторы в гильбертовом пространстве состояний, удовлетворяющие каноническим коммутационным соотношениям:

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0.$$

Из-за некоммутативности операторов координаты и импульса операторы наблюдаемых в общем случае некоммутативны. Поэтому они могут не быть одновременно измеримыми – для двух любых некоммутирующих наблюдаемых произведение их дисперсий в произвольном состоянии ограничено снизу:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \neq 0 \Rightarrow \forall |\psi\rangle: D_\psi A \cdot D_\psi B \geq \frac{1}{4} \overline{C}_\psi^2.$$

3. Координатное и импульсное представления наблюдаемых и векторов состояний.

Представлением в квантовой теории называют способ построения гильбертова пространства чистых состояний как пространства Волновых Функций – наборов значений коэффициентов разложения по базису из СФ какого-либо ПНН. Для определения в пространстве ВФ операторов наблюдаемых необходимо определить операторы координат и импульсов. Например, для одномерной системы в координатном представлении:

$$\psi(x) \equiv \langle x | \psi \rangle, \begin{cases} \hat{x}\psi(x) = x\psi(x) \\ \hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \end{cases},$$

а в импульсном представлении

$$\tilde{\psi}(p) \equiv \langle p | \psi \rangle, \begin{cases} \hat{p}\tilde{\psi}(p) = p\tilde{\psi}(p) \\ \hat{x}\tilde{\psi}(p) = i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial p} \end{cases}.$$

4. Эволюция квантовых систем: картины Шредингера и Гейзенберга. Уравнение непрерывности для плотности вероятности. Интегралы движения.

Существует бесконечно много унитарно эквивалентных способов описания эволюции квантовой системы. Два наиболее употребимых – картины Шредингера и Гейзенберга. В **первой** эволюционные изменения связывают с векторами состояния (операторы наблюдаемых не эволюционируют):

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \hat{H}\psi \\ \psi(t_0) &= \psi^{(0)} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \psi(t)$$

$$\hat{F} = F(\hat{x}, \hat{p}, t), \quad \hat{x}, \hat{p} = const$$

Из эволюционного уравнения Шредингера можно вывести уравнение непрерывности для плотности вероятности $\rho \equiv |\psi(\vec{r}, t)|^2$: $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\vec{j}) = 0$,

где поток вероятности $\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial \vec{r}} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \vec{r}} \right]$.

Во **второй** эволюция учитывается путем переопределения в каждый момент времени операторов наблюдаемых при неизменных векторах состояния:

$$\psi(t) \equiv \psi^{(0)} = const$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\hat{F}}{dt} &= \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}] \\ \hat{F}(t_0) &= \hat{F}_{III} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \hat{F}(t)$$

Здесь символ частного дифференцирования означает дифференцирование явной (неэволюционной) зависимости от времени.

Интегралы движения в квантовой теории – величины, распределение вероятностей реализации допустимых значений которых для данной системы не зависит от времени. Наблюдаемая есть интеграл движения тогда

и только тогда, когда $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}] = 0$.

5. **Нормировка векторов состояний, принадлежащих дискретному и непрерывному спектру. Плотность числа состояний в непрерывном спектре.**

Физически реализуемые состояния замкнутых квантовых систем описываются ВФ, принадлежащими дискретному спектру наблюдаемых. Так как квадрат модуля таких ВФ имеет смысл вероятности (плотности вероятности), то они должны быть нормированы на единицу. Если дополнительно потребовать ортогональности разных СФ используемого базиса, оба требования можно записать в виде:

$$\int \psi_n^* \cdot \psi_k dx = \delta_{nk}.$$

ВФ непрерывного спектра не описывают физически реализуемы состояния, но в некоторых задачах их удобно использовать в качестве базиса для разложения нормированных на единицу ВФ. В этом случае для них используют условие ортонормировки на дельта-функцию:

$$\int \psi_f^* \cdot \psi_{f'} dx = \delta(f - f').$$

Непрерывный спектр можно рассматривать как квазиклассический предел дискретного спектра. Тогда число состояний в элементе спектра должно быть конечно, и оно определяется по правилу: элементу классического фазового объема отвечают

$$dN = (2s + 1) \cdot \frac{d\mathbf{r} \cdot d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

квантовых состояний точечной частицы со спином s .

6. **Чистые и смешанные состояния. Оператор (матрица) плотности.**

Для незамкнутой квантовой системы можно строить ее описание, проводя усреднение по влиянию неконтролируемых внешних факторов. В этом случае теряется возможность сопоставления состояниям системы векторов состояний (ВФ) – от «чистых» состояний необходимо перейти к «смешанным», которым сопоставляются операторы плотности. Эти операторы можно определить, задав для них следующий набор свойств:

- эрмитовость: $\hat{\rho}^+ = \hat{\rho}$,
- нормировка: $Tr(\hat{\rho}) = 1$,
- неотрицательная определенность: $\forall |\psi\rangle: \langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle \geq 0$,
- $Tr(\hat{\rho}^2) < \infty$.

Для чистых состояний соответствующий оператор плотности является проектором на вектор состояния и удовлетворяет требованию

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}.$$

Оператор плотности смешанного состояния может быть представлен в виде комбинации проекторов на вектора некоторого набора состояний с весовыми коэффициентами, имеющими смысл вероятностей того, что результат измерения в смешанном состоянии будет совпадать с результатом измерения в соответствующем чистом состоянии.

Среднее значение наблюдаемой в смешанном состоянии вычисляется по формуле:

$$\bar{F}_\rho = Tr(\hat{\rho} \cdot \hat{F}).$$

7. **Линейный гармонический осциллятор: спектр, собственные функции, повышающий и понижающий операторы.**

Линейный гармонический осциллятор – система с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}.$$

Соответствующий спектр является дискретным, невырожденным и эквидистантным:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$CB: |n\rangle, \quad \psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \cdot \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right) \cdot H_n \left(x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right)$$

Удобно описывать осциллятор в представлении понижающих и повышающих операторов:

$$\hat{a} \equiv \frac{m\omega\hat{x} + i\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}}, \quad \hat{a}^+ \equiv \frac{m\omega\hat{x} - i\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \quad ([\hat{a}, \hat{a}^+] = 1),$$

действие которых на СВ гамильтониана описывается формулами:

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle.$$

8. Орбитальный момент количества движения: коммутационные соотношения, спектр и собственные функции.

Оператор орбитального момента в квантовой теории удобно определять в безразмерной форме:

$$\hat{l} \equiv \frac{1}{\hbar} [\hat{r} \times \hat{p}]$$

Разные компоненты орбитального момента одновременно не измеримы, но возможно одновременное измерение квадрата орбитального момента и его проекции на одну из осей, так как

$$\begin{aligned} [\hat{l}_i, \hat{l}_j] &= i \varepsilon_{ijk} \hat{l}_k \\ [\hat{l}_i, \hat{l}^2] &= 0 \end{aligned}$$

Собственными функциями оператора момента называют общие собственные функции операторов \hat{l}^2, \hat{l}_z . Собственные значения этих операторов

$$\begin{cases} \hat{l}^2 \psi_{lm} = l(l+1) \psi_{lm}, & l = 0, 1, 2, \dots \\ \hat{l}_z \psi_{lm} = m \psi_{lm}, & m = -l, -l+1, \dots, l \end{cases}$$

а соответствующие СФ в сферической системе координат

$$\psi_{lm} = R(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad Y_{lm}(\theta, \varphi) \equiv N_l P_l^m(\cos\theta) \cdot e^{im\varphi}.$$

9. Стационарные состояния в центрально-симметричном поле. Спектр изотропного осциллятора и атома водорода.

Для задач о движении частицы в центрально-симметричном поле

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(|\vec{r}|),$$

и динамика таких систем симметрична относительно произвольных преобразований поворота системы координат. Поэтому квадрат орбитального момента и его проекция на выделенное направление являются

интегралами движения и вместе с гамильтонианом составляют ПНН. Общие СФ этого ПНН, удовлетворяющие уравнениям

$$\begin{cases} \hat{H}\psi_{nlm} = E\psi_{nlm}, & E > U_{\min} \\ \hat{l}^2\psi_{nlm} = l(l+1)\psi_{nlm}, & l = 0, 1, 2, \dots \\ \hat{l}_z\psi_{nlm} = m\psi_{nlm}, & m = -l, -l+1, \dots, l \end{cases}$$

имеют вид

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

причем радиальная часть и уровни энергии находятся из решения уравнения

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0.$$

Уровни энергии вырождены по m : $E = E_{nl}$. Существуют две задачи с дополнительным вырождением: для кулоновского поля и изотропного гармонического осциллятора уровни энергии зависят только от главного квантового числа:

$$U = -\frac{\alpha}{r} \Rightarrow E_n = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$U = \frac{m\omega^2 r^2}{2} \Rightarrow E_n = \hbar\omega \cdot \left(n + \frac{3}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

10. Частицы спина $\frac{1}{2}$. Уравнение Паули.

Спин – собственный момент количества движения частицы. При безразмерном (в единицах \hbar) определении момента он может принимать целые либо полуцелые значения. Большинство частиц обычного вещества (протоны, нейтроны, электроны) – это частицы со спином $\frac{1}{2}$. Пространством чистых состояний для частицы со спином $\frac{1}{2}$ является пространство двухкомпонентных спинорных волновых функций, в котором оператор спина может быть определен с помощью матриц Паули:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{s} = \frac{1}{2} \cdot \vec{\sigma}, \quad \sigma_1 \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Свойства матриц Паули: они эрмитовы, бесследовые, удовлетворяют соотношениям $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \varepsilon_{ijk} \sigma_k$ и линейно независимы. Поэтому вместе с единичной матрицей они образуют полный базис в пространстве матриц 2×2 .

11. Уравнение Паули. Частицы со спином в однородном магнитном поле.

Эволюция спинорной ВФ частицы с зарядом e во внешнем электромагнитном поле описывается уравнением Паули:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}_P \Psi = \left[\frac{\left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2}{2m} + e\varphi(\vec{r}, t) - 2\mu_0 \hat{s} \cdot \text{rot} \vec{A}(\vec{r}, t) \right] \Psi.$$

Если магнитное поле является однородным: $\vec{B} = \vec{B}(t)$, то спинорную ВФ частицы со спином $\frac{1}{2}$ в любой момент времени можно представить в виде

произведений координатной и спиновой части, подчиняющихся независимым эволюционным уравнениям:

$$\Psi \equiv \phi(\vec{r}, t) \cdot \chi(t) \Rightarrow \begin{cases} i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \hat{H}_1 \phi = \left[\frac{\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2}{2m} + e\phi(\vec{r}, t) \right] \phi \\ i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = \hat{H}_s \chi = \left[-2\mu_0 \hat{s} \cdot \vec{B}(t) \right] \chi \end{cases} .$$

Если направление поля неизменно, то эволюция спинового состояния сводится к прецессии спина вокруг магнитного поля.

12. Правило сложения моментов в квантовой теории. Коэффициенты Клебша-Гордана.

Если момент количества движения квантовой системы складывается из суммы моментов количества движения подсистем:

$$\vec{j} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2,$$

то, независимо от их природы, собственные векторы операторов \hat{j}^2 , \hat{j}_z , \hat{j}_1^2 , \hat{j}_2^2 строятся из произведений векторов состояний подсистем

$$|jmj_1j_2\rangle = \sum_{m_1m_2} C_{jm}^{m_1m_2} (j_1j_2) \cdot |j_1m_1\rangle |j_2m_2\rangle,$$

где коэффициенты разложения (называемые коэффициентами Клебша-Гордана) отличны от нуля только при выполнении требований:

$$m = m_1 + m_2$$

$$j \in |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2$$

13. Правило квантования Бора-Зоммерфельда.

Для одномерной квантовой системы с односвязной областью классически допустимого финитного движения уровни энергии в квазиклассическом приближении могут быть определены из уравнения

$$\frac{1}{2\pi} \oint_{c(E)} p dx = \frac{1}{\pi} \int_a^b \sqrt{2m[E - U(x)]} dx = \hbar \cdot \left(n + \gamma + o\left(\frac{1}{n}\right) \right), \quad n \in Z$$

в котором $c(E)$ – фазовая траектория, отвечающая энергии E , а a и b – границы области классического движения, а постоянная $\gamma \sim 1$ определяется типом граничных условий:

$$\gamma \equiv \gamma(a) + \gamma(b), \quad \gamma(x) \equiv \begin{cases} 1/2, & x - \text{непроницаемая стенка} \\ 1/4, & x - \text{точка поворота} \\ 0, & x - \text{внутренняя точка} \end{cases} .$$

14. Коэффициент прохождения. Туннельный эффект. Проницаемость квазиклассического потенциального барьера.

В квантовой теории частица может проходить потенциальный барьер даже в том случае, когда ее энергия меньше высоты барьера. Это явление называется тунелированием. Вероятность тунелирования в общем случае вычисляется на основании решения стационарного уравнения Шредингера для энергий, отвечающих области непрерывного спектра. В случае, когда взаимодействие частицы с барьером квазиклассично (ширина барьера

существенно превосходит среднее значение длины волны), коэффициент прохождения барьера определяется выражением

$$T \equiv \frac{j_{i \rightarrow o}}{j_{i \rightarrow i}} \approx \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \cdot \int_a^b \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right],$$

в котором a и b – границы «подбарьерной» области движения частицы. Так как условием применимости квазиклассического приближения является требование

$$\frac{1}{\hbar} \cdot \int_a^b \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \gg 1,$$

то вычисляемые по этой формуле вероятности тунеллирования должны быть очень малы.

15. Первый порядок стационарной теории возмущений (в отсутствие и при наличии вырождения).

Стационарная Теория Возмущений предназначена для решения задач

$$\hat{H}\psi = E\psi,$$

в которых гамильтониан может быть разбит в сумму невозмущенного гамильтониана (для которого решение аналогичной задачи известно) и малого возмущения. Тогда решение может быть построено в виде быстро сходящихся рядов ТВ (по степеням возмущения)

$$\left. \begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{V} \\ \hat{H}_0 \psi_{n\alpha}^{(0)} &= E_n^{(0)} \psi_{n\alpha}^{(0)} \\ |\langle \psi_{n\alpha}^{(0)} | \hat{V} | \psi_{k\beta}^{(0)} \rangle| &\ll |E_n^{(0)} - E_k^{(0)}| \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} E_{n\alpha} \approx E_n^{(0)} + E_{n\alpha}^{(1)} + E_{n\alpha}^{(2)} + \dots \\ \psi_{n\alpha} \approx \psi_{n\alpha}^{(0)} + \psi_{n\alpha}^{(1)} + \psi_{n\alpha}^{(2)} + \dots \end{cases}$$

Формулы поправок теории возмущений различны для двух ситуаций:

- Если невозмущенный уровень энергии невырожден, то

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle, \quad \psi_n^{(1)} = \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \cdot \psi_k^{(0)}.$$

- При наличии вырождения необходим выбор невозмущенных ВФ, диагонализующий оператор возмущения в подпространстве состояний с данной энергией, и поэтому поправки к энергии 1-го порядка являются корнями секулярного уравнения

$$\det(V_{\alpha\beta}^{(n)} - E \delta_{\alpha\beta}) = 0, \quad V_{\alpha\beta}^{(n)} \equiv \langle \psi_{n\alpha}^{(0)} | V | \psi_{n\beta}^{(0)} \rangle, \quad \alpha, \beta = 1, \dots, s_n.$$

16. Вариационный принцип и «прямой» вариационный метод.

В соответствии с *вариационным принципом* основное уравнение стационарной теории квантовой системы – уравнение на СЗ и СФ для гамильтониана эквивалентно вариационной задаче на условный минимум функционала энергии (в классе функций, нормированных на единицу):

$$\hat{H}\psi = E\psi \Leftrightarrow \frac{\delta E[\psi]}{\delta \psi^*} \Big|_{\|\psi\|=1} = 0, \quad E[\psi] \equiv \int d\vec{r} \psi^* \hat{H} \psi.$$

Сама по себе вариационная задача обычно сложнее операторной, но ее можно использовать для построения приближенного решения операторной задачи. Для этого минимум энергии ищется в таком «узком» классе «пробных» функций, в котором его найти относительно несложно. Например, в прямом вариационном методе используются «пробные» функции заданного вида, содержащие некоторые «подгоночные» параметры

(их называют *вариационными параметрами*): $\psi^{(np)}(\alpha, \vec{r})$. На множестве таких функций энергия есть просто функция вариационных параметров:

$$E(\alpha) = \int d\vec{r} \psi^{(np)*} \hat{H} \psi^{(np)},$$

и нахождение ее минимума – относительно несложная задача.

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = 0 \Rightarrow \alpha_0, \quad E \approx E(\alpha_0), \quad \psi(\vec{r}) \approx \psi^{(np)}(\alpha_0, \vec{r}).$$

В результате этот метод позволяет найти наилучшее приближение к точному решению среди заданных «пробных» функций.

17. Уравнение Дирака. Свойства матриц Дирака.

Релятивистские квантовые частицы со спином $\frac{1}{2}$ описываются теорией Дирака. Волновое уравнение для свободных частиц имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = [c \vec{\alpha} \hat{p} + mc^2 \beta] \Psi \quad (\text{гамльтонова форма}),$$

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - mc/\hbar) \Psi = 0 \quad (\text{ковариантная форма}),$$

в котором Ψ – четырехкомпонентная дираковская ВФ (дираковский спинор), а матрицы Дирака определяются набором свойств

1. $\alpha = \alpha^+, \beta = \beta^+, \gamma^0 \equiv \beta, \vec{\gamma} = \beta \vec{\alpha}$
2. $\text{Tr}(\alpha) = \text{Tr}(\beta) = \text{Tr}(\gamma^\mu) = 0$
3. $\alpha_i^2 = \beta^2 = 1, \{\alpha_i, \beta\} = \{\alpha_i, \alpha_j\} = 0 (i \neq j) \Rightarrow \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}$

с точностью до унитарного преобразования. В стандартном представлении их явный вид:

$$\beta = \gamma^0 = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}, \quad \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}.$$

18. Дираковский вакуум. Электроны и позитроны. Ограниченность одночастичной интерпретации решений уравнения Дирака.

В теории Дирака для релятивистских частиц

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

причем состояниям с отрицательными значениями энергии приписывается статус физических состояний. В связи с этим необходимо предотвратить «падение» частиц с уровней с положительными энергиями на уровни с отрицательными. Для этого было предложено считать, что в основном (вакуумном) состоянии электрон-позитронного поля все уровни с отрицательными энергиями заняты, а с положительными – свободны. При сообщении такому «дираковскому вакууму» энергии, превышающей $2mc^2$, возможен переход частицы с уровней с $E < 0$ на уровни с $E > 0$. Тогда на фоне вакуума мы наблюдаем частицу (электрон с отрицательным зарядом) и «дырку», воспринимаемую нашей измерительной аппаратурой как частицу с положительным зарядом – позитрон. Такие образования называют античастицами. При столкновении частицы и античастицы возможна их аннигиляция (в действительности являющаяся обратным переходом с уровня с $E > 0$ на уровень с $E < 0$) с выделением энергии. Любая частица и античастица наблюдается нами только на фоне вакуума, и вакуум влияет на ее состояние, так как он в силу квантовых флуктуаций энергии постоянно рождает виртуальные пары частица-античастица, взаимодействующие с реальной частицей при ее движении в вакууме. По этой причине любой

локализованный в пространстве и времени волновой пакет из дираковских ВФ обязательно содержит вклад состояний с отрицательной энергией, то есть является суперпозицией состояний частицы и античастицы. В результате оказывается, что решение уравнения Дирака может быть интерпретировано как одночастичная ВФ только приближенно, для нерелятивистских частиц (у таких волновых пакетов доля состояний с отрицательной энергией мала).

19. Уравнение Дирака для частиц во внешнем электромагнитном поле. Квазирелятивистское приближение теории Дирака.

При включении внешнего электромагнитного поля уравнение Дирака следует переписать в виде:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[c \vec{\alpha} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(t, \vec{r}) \right) + mc^2 \beta + e\phi(t, \vec{r}) \right] \Psi$$

Замечательной особенностью этого уравнения является то, что в нерелятивистском пределе оно воспроизводит результаты феноменологической теории Паули: «малая» компонента дираковской спинорной ВФ (объединяющая две нижние компоненты Ψ для решений с положительной энергией) становится мала и не является динамической переменной – она однозначно строится по «большой» (две верхние компоненты). При этом эффективное уравнение для получающейся двухкомпонентной ВФ есть в точности уравнение Паули. В связи с этим интересно исследовать квазирелятивистское (с сохранением слагаемых порядка $(v/c)^2$) приближение теории Дирака – оно будет определять поправки к теории Паули. Анализ показывает, что добавочные слагаемые в гамильтониан Паули имеют вид:

$$\hat{V}^{(2)} = \hat{V}_{кин} + \hat{V}_{ls} + \hat{V}_D,$$

где $\hat{V}_{кин} = -\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}$ - поправка к выражению для кинетической энергии,

$\hat{V}_{ls} = -\frac{e\hbar}{8m^2c^2} \left\{ i\hbar (\hat{\sigma} \cdot rot \vec{E}) + 2\hat{\sigma} [\vec{E} \times \hat{p}] \right\}$ - спин-орбитальное взаимодействие,

$\hat{V}_D = -\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \cdot div \vec{E}$ - поправка Дарвина, учитывающая нелокальность

нерелятивистских состояний с точки зрения релятивистской теории (В релятивистской теории ВФ не описывают «одночастичных» состояний, поэтому измеряемая «эффективная координата» нерелятивистской частицы испытывает флуктуации порядка \hbar/mc частотой порядка mc^2/\hbar . Усреднение энергии взаимодействия с электрическим полем по этим флуктуациям позволяет получить выражение для этой поправки).