Китаев А.Е.
kitaev_a_e@mail.ru

Возможный путь обобщения уравнения Дирака.

В ряде источников уже высказывалась мысль о том, что настоящее уравнение, описывающее спинорную материю, должно быть уравнением второго порядка [1]. Мы, следуя этой идее, начнем с рассмотрения простой системы, описываемой с помощью обыкновенных дифференциальных уравнений. Это – гармонический осциллятор. Выпишем его классический гамильтониан:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{x^2 m w_0^2}{2}$$

Если ввести новые координаты (их часто называют координатами рождения-уничтожения или «нормальными колебаниями», см например [2]) по формулам

$$x = \frac{a + a^*}{\sqrt{2mw_0}}$$

$$p = \frac{a - a^*}{i\sqrt{2}}\sqrt{mw_0}\ ,$$

тогда мы получим такое выражение для H:

$$H = aa^* w_0$$

Если быть точными, то пока у нас нет оснований считать это выражение для энергии именно гамильтонианом. Нужно показать, что из него можно получить уравнения Гамильтона в переменных рождения-уничтожения. Попробуем сделать это. Используем выражения для координат рождения-уничтожения через обычные координату и импульс.

$$a = \frac{x\sqrt{mw_0}}{\sqrt{2}} + \frac{ip}{\sqrt{2}\sqrt{mw_0}}$$

$$a^* = \frac{x\sqrt{mw_0}}{\sqrt{2}} - \frac{ip}{\sqrt{2}\sqrt{mw_0}}$$

Продифференцируем выражение для *a*:

$$\dot{a} = \frac{\dot{x}\sqrt{mw_0}}{\sqrt{2}} + \frac{i\dot{p}}{\sqrt{2}\sqrt{mw_0}}$$

Внимание: в этом месте мы должны полагать, что w_0 есть константа и не зависит от времени. Но попробуем считать, что она все таки зависит от t, но медленно. Так что производными w_0 по времени пренебрегаем.

Используем выражения для производных x и p через обычные уравнения Гамильтона (то-есть в координатах x и p).

$$\dot{a} = \frac{\sqrt{mw_0}}{\sqrt{2}}\frac{\partial H}{\partial p} + \frac{i}{\sqrt{2}\sqrt{mw_0}}\left(-\frac{\partial H}{\partial x}\right) \qquad (1)$$

Далее преобразуем производные H следующим образом:

$$\frac{\partial H}{\partial p}=\frac{\partial H}{\partial a}\frac{\partial a}{\partial p}+\frac{\partial H}{\partial a^*}\frac{\partial a^*}{\partial p}=\frac{\partial H}{\partial a}\frac{i}{\sqrt{2}\sqrt{mw_0}}+\frac{\partial H}{\partial a^*}(-\frac{i}{\sqrt{2}\sqrt{mw_0}})$$

$$\frac{\partial H}{\partial x}=\frac{\partial H}{\partial a}\frac{\partial a}{\partial x}+\frac{\partial H}{\partial a^*}\frac{\partial a^*}{\partial x}=\frac{\partial H}{\partial a}\frac{\sqrt{mw_0}}{\sqrt{2}}+\frac{\partial H}{\partial a^*}\frac{\sqrt{mw_0}}{\sqrt{2}}$$

Далее, подставляя эти выражения в (1), получим:

$$\dot{a}=-i\frac{\partial H}{\partial a^*}=\frac{\partial H}{\partial (ia^*)}$$

Аналогично – для сопряженной величины (производной a^*). Легко придти к выводу, что величину ia^* имеет смысл считать обобщенным импульсом, и тогда гамильтониан получается таким:

$$H=-ia(ia^*)w_0$$

От этого гамильтониана можно перейти к лагранжиану, который будет иметь такой вид:

$$L=-aa^*w_0+ia^*\dot{a}-ia\dot{a}^*$$

Видно, что величина лагранжиана остается постоянной (инвариантной, как выражаются математики), если изменять фазу комплексной величины a. С помощью теоремы Нетер [4,5] можно найти соответствующую сохраняющуюся величину (интеграл движения). Это

$$aa^*$$

Этот интеграл равен отношению гамильтониана и частоты

$$aa^*=\frac{H}{w_0}$$

Эта же величина известна в механике как адиабатический инвариант, сохраняющийся лишь приближенно в случае медленности параметрического воздействия на систему (в нашем случае параметрическое воздействие учтено зависимостью от времени частоты w_0).

Бросается в глаза, что лагранжиан для осциллятора и адиабатический инвариант (выраженные через координаты рождения-уничтожения) очень напоминают лагранжиан (точнее плотность функции Лагранжа) и плотность заряда для уравнения Дирака. Приведем для сравнения формулы для этих величин:

$$l=-\hbar c(\frac{1}{2i}\psi^+\alpha_4\frac{\partial\psi}{\partial x_4}+\frac{1}{2i}\psi^+\alpha_1\frac{\partial\psi}{\partial x_1}+\frac{1}{2i}\psi^+\alpha_2\frac{\partial\psi}{\partial x_2}+\frac{1}{2i}\psi^+\alpha_3\frac{\partial\psi}{\partial x_3}-$$
$$-\frac{1}{2i}\frac{\partial\psi^+}{\partial x_4}\alpha_4\psi-\frac{1}{2i}\frac{\partial\psi^+}{\partial x_1}\alpha_1\psi-\frac{1}{2i}\frac{\partial\psi^+}{\partial x_2}\alpha_2\psi-\frac{1}{2i}\frac{\partial\psi^+}{\partial x_3}\alpha_3\psi+$$
$$+k_0\psi^+\alpha_0\psi) \qquad (2)$$

$$\rho=e(\psi_1^*\psi_1+\psi_2^*\psi_2+\psi_3^*\psi_3+\psi_4^*\psi_4)$$

Далее перейдем к рассмотрению квантовомеханических уравнений с частными производными. Будем считать, что при отсутствии электромагнитных полей четверка компонент биспинора, описывающего электронную материю, подчиняется уравнениям Клейна-Фока (соответственно, потенциалы электромагнитного поля в них учитывать пока не будем). Введем такой импульс:

$$\Pi = \frac{1}{4\pi c^2}\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{4\pi c^2}\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}$$

Плотность гамильтониана можно записать так:

$$h = 2\pi c^2 \Pi^T \Pi + \frac{1}{8\pi}(grad\ u)^T\ grad\ u + \frac{k_0^2}{8\pi} u^T u$$

Здесь $k_0 = \frac{mc}{\hbar}$.

Если поля пропорциональны

$e^{i\vec{k}\vec{r}}$,

то

$$h = 2\pi c^2 \Pi^T \Pi - \frac{\vec{k}^2}{8\pi} u^T u + \frac{k_0^2}{8\pi} u^T u \qquad (3)$$

Знак «Т» здесь означает транспонирование матрицы, то-есть превращает матрицу-столбец в матрицу-строку.

Введем такие величины:

$$\varphi = \frac{u}{\sqrt{E}} a_1 + \frac{i}{\sqrt{E}}(b_1 \alpha_0 \Pi + b_2(\gamma_x k_x + \gamma_y k_y + \gamma_z k_z)u)$$

$$\varphi^+ = \frac{u^T}{\sqrt{E}} a_1 - \frac{i}{\sqrt{E}}(b_1 \Pi^T \alpha_0 + b_2 u^T(\gamma_x k_x + \gamma_y k_y + \gamma_z k_z))$$

где матрицы «гамма» равны матрицам Дирака, умноженным на α_0 (см. книгу Фейнмана [6], где с использованием этих матриц формулируется уравнение Дирака), а числа a_1, b_1, b_2 – это некоторые коэффициенты.

Если мы вычислим величину

$$E\varphi^+\varphi$$

то увидим, что она окажется равной плотности гамильтониана h (формула 3), если

$$a_1 = \frac{k_0}{2\sqrt{2\pi}},$$

$$b_1 = c\sqrt{2\pi},$$

$$b_2 = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}}$$

Является ли эта величина плотностью гамильтониана? Сможем ли мы с помощью уравнений Гамильтона получить из этой величины уравнение Дирака? На этот счет имеются сомнения – в частности из-за того, что в выражение входит энергия Е, равная (как мы знаем из квантовой механики) частоте, умноженной на постоянную Планка. Это заставляет думать, что полученный результат является преобразованием Фурье от настоящей плотности гамильтониана.

Если считать, что

$$\varphi e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \psi,$$

то плотность гамильтониана, точнее, пока просто энергии, можно записать так (уже с использованием временных производных):

$$h = \frac{i\hbar}{2}\psi^{+}\dot{\psi} - \frac{i\hbar}{2}\dot{\psi}^{+}\psi$$

А от этого выражения можно перейти к формуле, где задействован обобщенный импульс:

$$h = -cp(\alpha_1\frac{\partial\psi}{\partial x_1} + \alpha_2\frac{\partial\psi}{\partial x_2} + \alpha_3\frac{\partial\psi}{\partial x_3}) - (\frac{\partial\psi^{+}}{\partial x_1}\alpha_1 + \frac{\partial\psi^{+}}{\partial x_2}\alpha_2 + \frac{\partial\psi^{+}}{\partial x_3}\alpha_3)p^{+}c -$$
$$-ick_0 p\alpha_0\psi + ick_0\psi^{+}\alpha_0 p^{+}$$

Импульс p выражается так:

$$p = -\frac{\hbar}{2i}\psi^{+},$$
$$p^{+} = \frac{\hbar}{2i}\psi$$

С помощью такой плотности гамильтониана (уже именно гамильтониана) легко получить уравнение Дирака.

До сих пор мы считали величину k_0 постоянной (так же, как и w_0 в случае гармонического осциллятора). Но разумно предположить, что в случае, если она слабо зависит от времени и от пространственных координат, приведенные формулы останутся справедливыми.

Сделаем такой переход для биспинорного уравнения Клейна-Фока, куда, как до сих пор предполагалось, потенциалы электромагнитного поля не входят.

$$k_0^2 -> k^2(t,\vec{r}) = k_0^2 + \mu W(t,\vec{r}), \quad \mu - \text{малая величина.}$$

Тогда величина k (которой мы заменили величину k_0 в гамильтониане) будет иметь вид:

$$k = \sqrt{k_0^2 + \mu W} = \sqrt{k_0^2(1 + \frac{\mu W}{k_0^2})}$$

При стремлении μW к нулю квадратный корень можно разложить в ряд, оставив только первые два члена

$$k \approx k_0(1 + \frac{\mu W}{2k_0^2}) =$$
$$= k_0 + \frac{\mu W}{2k_0}$$

Какой вид может иметь функция W? В качестве гипотезы предложим такую формулу:

$\mu W_1(t,\vec{r}) = \alpha_0(\varphi + \vec{\gamma}\vec{A})$, где A и φ - потенциалы электромагнитного поля, а матрицы «гамма» в матричном «векторе» равны матрицам Дирака, умноженным на α_0 (см. [6]). Или:

$\mu W_2(t,\vec{r}) = \alpha_0(\varphi + \vec{\alpha}\vec{A})$ (здесь используются непосредственно матрицы Дирака).

Во втором случае при малой величине потенциалов в уравнении, выводимом из гамильтониана (т.е. уравнении типа Дирака), появится характерное слагаемое, равное вектору из матриц Дирака, скалярно умноженному на сумму градиента и величины, пропорциональной векторному потенциалу электромагнитного поля. То-есть малым параметром является сам потенциал. Таким образом, здесь требуется не только плавность изменения потенциалов, но и их малая абсолютная величина.

От плотности функции Гамильтона (гамильтониана) можно перейти к плотности лагранжиана (2), уже приведенной выше. Так как она не зависит от фазы волновой функции, мы с помощью теоремы Нетер получим, что величина

$$\psi^{+}\psi = \psi_1^{*}\psi_1 + \psi_2^{*}\psi_2 + \psi_3^{*}\psi_3 + \psi_4^{*}\psi_4$$

является интегралом и подчиняется уравнению непрерывности (куда входит и ток $c\psi^{+}\vec{\alpha}\psi$). Но так как уравнение Дирака, которое можно получить как из гамильтониана, так и из лагранжиана, выполняется приближенно, то и интегралом вышеприведенная величина (которую можно домножить на величину элементарного электрического заряда, чтоб получить плотность заряда) является лишь приближенно. То-есть это – адиабатический инвариант, сохраняющийся при плавном изменении электромагнитных потенциалов (или при их отсутствии). Отметим здесь также, что аналогом величины

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^{+}\psi) + div(c\psi^{*}\vec{\alpha}\psi)$$

в рассмотренном выше случае гармонического осциллятора является

$$\frac{d}{dt}(a^{*}a)$$

Каким же образом можно нарушить сохранение адиабатического инварианта? Для этого воздействие на систему должно быть резким, скачкообразным. Кроме того, по-видимому, возможен и еще один вариант. В.И.Арнольд в своей книге [3, стр.259] отмечает, что даже плавное воздействие на частоте, соответствующей параметрическому резонансу (это удвоенная собственная частота, поделенная на небольшое целое число N), может привести к раскачке маятника (т.е. к несохранению адиабатического инварианта). Для случая уравнений в частных производных должен наблюдаться аналогичный эффект.

Список литературы:

1) А.В.Андреев «Релятивистская квантовая механика» М. Физматлит 2009.
2) М.И.Рабинович, Д.И.Трубецков «Введение в теорию колебаний и волн» М. “Наука” 1984.
3) В.И.Арнольд «Математические методы классической механики» М. “Наука” 1974.
4) Н.Н.Боголюбов, Д.В.Ширков «Квантовые поля» М. Физматлит 2005.
5) П.Рамон «Теория поля» М. “Мир” 1984.
6) Р.Фейнман «Квантовая электродинамика» М Книжный дом «Либроком» 2008,2009
7) А.Соколов, Д.Иваненко «Квантовая теория поля» Москва, Ленинград, «Государственное издательство технико-теоретической литературы» 1952.
8) А. С. Давыдов «Квантовая механика» М. “Наука” 1973.
9) Г. Голдстейн «Классическая механика» М. “Наука” 1975.