文章编号:1674-2869(2010)07-0107-04

相对论量子力学方程的求解新方案

刘雅超,黎　明

(西安理工大学应用物理系,陕西 西安 710048)

摘　要:在相对论量子力学中引入了正反粒子指标的新概念,给出求解相对论量子力学方程的新方案.用新方案重新求解狄拉克(Dirac)方程,消除了与负能量相关的困难.得到了与量子场论一致的自由正反旋量粒子波函数.最后重新定义了反粒子的能量和动量算符.

关键词:正反粒子指标;相对论量子力学;负能量;负能解

中图分类号:O413.1　　文献标识码:A　　doi:10.3969/j.issn.1674-2869.2010.07.026

0　引　言

自从相对论量子力学诞生以来,取得了巨大的成就,同时也伴随着一些未能解决的理论困难,其中最主要的是负能解问题[1].历史上,Dirac 曾为此提出著名的"负能电子海"假设[2],将真空解释为充满负能电子的海洋,由 Pauli 不相容原理保证真空的稳定性.而将真空中负能电子的空穴解释为有着正能量,正电荷的正电子(Positron).如今,负能电子海的真空观念已被抛弃,而正反粒子的观念在量子场论中保留了下来.量子场论的基本观点是粒子有正反,能量只有正[1];而现有相对论量子力学的求解却不能回避负能解,它的结论只能是电子无反正,能量有正负.这使得从量子力学到量子场论的过度理论——相对论量子力学处于尴尬的境地.

在相对论量子力学里,把负能量的电子解释为正能量的正电子,以便向场论靠拢[3-4].而在量子场论的 Feynman 图计算中,却又要将正电子处理为逆着时间轴演化的负能电子,并且能量的积分依然是从负无穷到正无穷[5].尽管如此,许多支持场论的人都对相对论量子力学不屑一顾,认为该理论逻辑不自洽,结论不可靠.他们忘了,场论的基本观念和方程都直接来自相对论量子力学.

在此,笔者关注的是相对论量子力学和量子场论的协调一致性问题.负能解困难或可避免[6],或另有深意[7].笔者认为,问题出在数学的求解而不在物理的方程.所以,目标是寻找一个新的求解方案,在相对论量子力学里贯彻粒子有正反的观念,坚持能量只为正的原则,最终通过新方案求解相对论量子力学方程得到与量子场论一致的自由粒子的正交归一平面波解.本文首先回顾量子力学和相对论量子力学的传统求解方案及其主要结果,然后在对场论中正反自由旋量粒子波函数的对比分析中映入新的求解方案,最后通过对 Dirac 方程的重新求解验证了新方案.

1　传统量子力学求解方案

从非相对论量子力学到相对论量子力学,理论从低能量走向高能量,从单粒子变成包含正反粒子,当存在相互作用时还会出现粒子的产生和湮灭.在这个过程中,非相对论量子力学一些要求就不再适用于相对论量子力学,例如波函数的正定性和归一性.但在相对论量子力学的求解方案中,波函数的相位因子部分,未加详细审查,直接沿用了非相对论量子力学的旧形式.而这是造成相对论量子力学中负能量困难的根本原因.在此首先对已有理论及其求解方法做个回顾.

1.1　非相对论量子力学

在非相对论量子力学中,粒子波函数 满足的基本方程是 Schrodinger 方程:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=\hat{H}\psi(\boldsymbol{r},t)=\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2+\hat{V}(\boldsymbol{r},t)\right]\psi(\boldsymbol{r},t)\qquad(1)$$

其中 $\hat{H}$ 是哈密顿算符,$\hat{V}(\boldsymbol{r},t)$ 是势函数算符,$(\boldsymbol{r},t)$ 代表位矢.能量和动量的两个基本算符是

$$\hat{E}=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t},\hat{P}=-\mathrm{i}\hbar\nabla\qquad(2)$$

收稿日期:2010-04-10

基金项目:西安理工大学青年科学研究计划项目 108-210828

作者简介:刘雅超(1980-),男,陕西西安人,助教,理学硕士.研究方向:低维纳米量子体系电学性质.

对于自由粒子,势场 $\hat{V}(\boldsymbol{r},t)$ 为零,方程化为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t)=\hat{H}_f\psi(\boldsymbol{r},t) \quad (3)$$

求解方案是设波函数的形式为 debrogile 波

$$\psi=A\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{P},\boldsymbol{r}-Et)/\hbar] \quad (4)$$

$\boldsymbol{P}$ 是粒子的动量矢量,E 代表粒子能量. 代入(3)解本征值问题,得能谱

$$E=\frac{P^2}{2m} \quad (5)$$

满足非相对论动能关系. 可知自由粒子的动能非负.

1.2　相对论量子力学

在相对论量子力学中,自由 Dirac 粒子的基本方程是 Dirac 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=[c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\nabla+\hat{\boldsymbol{\beta}}mc^2]\psi(\boldsymbol{r},t) \quad (6)$$

其中 $\hat{\boldsymbol{\alpha}},\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 是四维系数矩阵,在此采用 Paul-Dirac 表象.

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}}=\begin{pmatrix}0&\hat{\boldsymbol{\sigma}}\\ \hat{\boldsymbol{\sigma}}&0\end{pmatrix}\quad\hat{\boldsymbol{\beta}}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}&0\\0&-\boldsymbol{I}\end{pmatrix} \quad (7)$$

其中 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 是 Pauli 矩阵,$\boldsymbol{I}$ 是二维单位矩阵. 标准的求解方法是沿用非相对论的求解方案. 考虑到波函数的多分量性,相对论旋量粒子的波函数取作

$$\psi=U(\boldsymbol{P}\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar] \quad (8)$$

其中 φ,χ 是二分量旋量. 代入(6)求解得能量的本征值

$$E=E_{\pm}=\pm E_p=\pm\sqrt{m^2c^4+p^2c^2} \quad (9)$$

能量本征值有正有负. 其中 $E=E_+=\sqrt{m^2c^4+P^2c^2}=E_p$ 与相对论能量关系一致,与之对应的的本征函数是

$$\psi(\boldsymbol{P},E_+)=U_+(\boldsymbol{P})\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}-E_pt)/\hbar=\begin{pmatrix}\varphi\\ \dfrac{c\hat{\sigma}\cdot\boldsymbol{P}}{E_p+mc^2}\varphi\end{pmatrix}\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}-E_pt)/\hbar] \quad (10-\mathrm{a})$$

称为正能量解. 而与 $E=E_-=-\sqrt{m^2c^4+P^2c^2}$ 对应的本征波函数是

$$\psi(\boldsymbol{P},E_-)=U_-(\boldsymbol{P})\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}+E_pt)/\hbar]=\begin{pmatrix}\dfrac{-c\hat{\sigma}\cdot\boldsymbol{P}}{E_p+mc^2}\chi\\ \chi\end{pmatrix}\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}-E_pt)/\hbar \quad (10-\mathrm{b})$$

称为"负能量"解. (10-a)、(10-b)两式中二分量旋量 φ,χ 待定,将其取作与哈密顿量 $\hat{H}$ 对易的螺旋度算符 $\dfrac{\hat{\Sigma}\cdot\hat{P}}{|P|}$ 的本征态

$$\hat{\Sigma}=\begin{pmatrix}\hat{\sigma}&\\&\hat{\sigma}\end{pmatrix},\varphi_\alpha=\chi_\alpha=\begin{cases}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}&\alpha=1\\[2ex]\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}&\alpha=2\end{cases} \quad (11)$$

在场论中用到的正粒子和反粒子的波函数形式是

$$\psi^{(+)}=\psi(\boldsymbol{P},E_+)=u_\alpha(p)\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{P},\boldsymbol{r}-E_pt)/\hbar]=\begin{pmatrix}\varphi_\alpha\\ \dfrac{c\hat{\sigma}\cdot\boldsymbol{P}}{E_p+mc^2}\varphi_\alpha\end{pmatrix}\exp(\mathrm{i}px/\hbar) \quad (12-\mathrm{a})$$

$$\psi^{(-)}=\psi(-\boldsymbol{P},E_-)=v_\alpha(p)\exp[\mathrm{i}(-\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}-E_pt)/\hbar]=\begin{pmatrix}\dfrac{c\hat{\sigma}\cdot\boldsymbol{P}}{E_p+mc^2}\chi_\alpha\\ \chi_\alpha\end{pmatrix}\exp(-\mathrm{i}px/\hbar) \quad (12-\mathrm{b})$$

通常称为正频解和负频解[8]. 其中 $p=(\boldsymbol{P},E_p)$,$x=(\boldsymbol{r},t)$ 分别是四维动量矢量和四维坐标矢量,而 $Px=P^\mu x_\mu=(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}-E_pt)$. 我们看到,当 P 为零时,由此还会引出所谓"负质量"的推断. 然而自然界没有发现负能量的自由电子,更没有负质量的电子;并且电子的负能解还会导致真空的不稳定. 这些就是相对论量子力学所遇到的负能量困难.

笔者认为,这些困难不是相对论量子力学所固有的,问题出在数学的求解方法上. 要找到一个新方案,在相对论量子力学的求解中,贯彻粒子有正反的观念,坚持能量只为正的原则,最终得到场论里所用的自由粒子的正交归一化平面波解.

2　相对论量子力学求解新方案

从对原有求解方案的分析入手. 在非相对论量子力学分离变量的求解方案(4)中,波函数时空部分取为平面波的虚指数形式 $\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar]$,求解后能量恒为正. 在相对论量子力学的求解方案(8)中,人们未加分析的沿用了相同的指数因子 $\mathrm{i}(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar$,但结果却出现了负能量. 而笔者认为负能量波函数应该是正能量的反粒子的波函数. 应当在波函数的形式中体现正反粒子的存在. 我们注意指数因子中含有虚数单位,它是负一的一个平方根,而 -1 还有另一个平方根 $-\mathrm{i}$,它们还互为复共轭. 正好 i 对应正粒子,而 $-\mathrm{i}$ 对应反粒子[9].

因此，笔者试将指数因子形式取作 $\mathrm{i}s(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar$，其中 s 称为正反粒子指标，$s=+1$ 对应正粒子，$s=-1$ 代表反粒子. 如此，(4)时变成

$$\psi=A\exp[\mathrm{i}s(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar] \tag{13}$$

先代入自由粒子的 Schrodinger 方程(3)，得能谱为

$$E=s\frac{p^2}{2m} \tag{14}$$

要求能量为正，则只能取 $s=+1$. 能谱退化为(5). 由此可知，Schrodinger 方程(3)是正粒子的非相对论量子力学方程.

考虑了正反粒子指标，相对论量子力学的新求解方案将自由 Dirac 粒子波函数设为

$$\psi_s=U_s(\boldsymbol{P})\exp[\mathrm{i}s(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar]=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}\exp[\mathrm{i}s(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar] \tag{15}$$

代入自由 Dirac 方程(6)，得本征方程

$$sE\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}mc^2 & sc\hat{\sigma}\cdot\boldsymbol{P}\\ sc\hat{\sigma}\cdot\boldsymbol{P} & -mc^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} \tag{16}$$

求解本征值问题，得能谱

$$sE=\pm\sqrt{p^2c^2+m^2c^4}=\pm E_p \tag{17}$$

其中已考虑到 $s^2=1$. 贯彻能量为正的原则：当上式右边取正号是，左边只能取 $s=+1$，以此保证能量 $E=E_p$ 为正，当右边为负号时，左边只能取 $s=-1$，此时能量还是 $E=E_p$. 如此，无论对正粒子还是反粒子，能量都为正. 而相应的正反自由相对论粒子波函数统一写作

$$\psi_s(\boldsymbol{P},E_+)=U_s(\boldsymbol{P})\exp[\mathrm{i}s(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}-E_pt)/\hbar]=\begin{pmatrix}\varphi_\alpha\\ \dfrac{sc\hat{\sigma}\cdot\boldsymbol{P}}{sE_p+mc^2}\varphi_\alpha\end{pmatrix}\exp[\mathrm{i}spx/\hbar] \tag{18}$$

可以看出，对于正粒子有 $s=+1$，它的波函数与旧方案所得(12-a)相同，即 $\psi_{+1}(\boldsymbol{P},E_p)=\psi^{(+)}=\psi(\boldsymbol{P},E_p)$. 对于反粒子，$s=-1$，其波函数为

$$\psi_-(\boldsymbol{P},E_p)=U_-(\boldsymbol{P})\exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{P},\boldsymbol{r}-E_pt)/\hbar]=\begin{pmatrix}\varphi_\alpha\\ \dfrac{-c\hat{\sigma}\cdot\boldsymbol{P}}{-E_p+mc^2}\varphi_\alpha\end{pmatrix}\exp[-\mathrm{i}px/\hbar] \tag{19}$$

似乎与负能解(10-b)及负频解(12-b)都不同. 进一步分析，我们发现

$$\left(\frac{c\hat{\sigma}\cdot\boldsymbol{P}}{E_p+mc^2}\right)\psi_-(\boldsymbol{P},E_p)=\left(\frac{c\hat{\sigma}\cdot\boldsymbol{P}}{E_p+mc^2}\right)\begin{pmatrix}\varphi_\alpha\\ \dfrac{-c\hat{\sigma}\cdot\boldsymbol{P}}{-E_p+mc^2}\varphi_\alpha\end{pmatrix}\exp[-\mathrm{i}Px/\hbar]=$$

$$\begin{pmatrix}\dfrac{c\sigma\cdot\boldsymbol{P}}{E_p+mc^2}\varphi_\alpha\\ \varphi_\alpha\end{pmatrix}\exp[-\mathrm{i}px/\hbar]=\psi(-\boldsymbol{P},-E_p)=\psi^{(-)} \tag{20}$$

(20)式表明，直接得到了量子场论中的反粒子波函数——负频解. 至此，完成了我们的目标. 而为了反粒子波函数与量子力学的算符运算一致，需引入另一组与正粒子能量和动量算符互为复共轭的反粒子算符[9]

$$\hat{E}_c=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t},\hat{P}_c=\mathrm{i}\hbar\nabla \tag{21}$$

用它们作用到反粒子波函数上

$$\hat{E}_c\psi_-(\boldsymbol{P},E_p)=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_-(\boldsymbol{P})\times\exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}-E_pt)/\hbar]=E_p\psi_-(\hat{P},E_p)$$

$$\hat{P}_c\psi_-(\boldsymbol{P},E_p)=-\mathrm{i}\hbar\nabla U_-(\hat{P})\times\exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}-E_pt)/\hbar]=\vec{P}\psi_-(\boldsymbol{P},E_p) \tag{22}$$

所得能量为正，所得动量矢量为 $\boldsymbol{P}$，这是我们所期望的. 而正反粒子的能量和动量算符还可统一写作

$$E_s=\mathrm{i}s\hbar\frac{\partial}{\partial t},\hat{P}_s=-s\mathrm{i}\hbar\nabla(s=\pm1) \tag{23}$$

我们看到，互为复共轭的两组算符在相对论量子力学中对称的出现了.

3 结　语

本研究是一个新的求解相对论量子力学方程的基本方案. 它在量子力学的框架中对称地处理了正反粒子，消除了旧理论所出现的负能量的困难. 不仅适用于 Dirac 方程，也适用于 Klein-Cordon 方程. 由此出发，我们可以重新讨论在电磁场中的相对论量子力学方程即其非相对论退化；可以在理论上正反粒子对称地讨论 Klein 佯谬，相对论电子颤振(zitterbewegung)；还可以进一步重新处理场的量子化方案，解决其中的真空能量和粒子数为无穷大的问题. 此外，该方案还可用于求解石墨单层(graphene)中电子所满足的二维 Dirac 方程，进而研究低维相对论量子体系的电学性质.

参考文献：

[1] 张永德. 高等量子力学：上册[M]. 北京：科学出版社，2009：219-237，284.

[2] Dirac P A M. The Principles of Quantum Mechanics [M]. Fourth edition. Oxford: The Clarendon Press, 1958：273-274.

[3] Grainer W, Muller B, Rafelski J. Quantum Electrodynamics of Strong Fields [M]. Berlin:

Springer-verlag,1985:130－136.
[4] Strange P. Relativistic Quantum Mechanics [M]. New York:Cambridge University Press,1998:145－150.
[5] 佩斯金，施罗德.量子场论导论[M].北京:世界图书出版公司北京公司,2006:62－63.
[6] 王顺金,周善贵,Pauli H C. Dirac粒子的正-反粒子自由度和正-反粒子量子数[J].原子核物理评论,2004,21(4):294－297.
[7] 张一方.量子力学和相对论的结合,不相容及发展[J].云南大学学报:自然科学版,2008,30(1):41－46.
[8] Weinberg S. The Quantum Theory of Fields :Vol. I [M].北京:世界图书出版公司北京公司,2004:219－224.
[9] Ni G J, Guan H, Zhou W M,et al. Anti-particle in the Light of Einstein-Podolsky-Rosen Paradox and Klein Paradox [J]. Chinese Phys Lett,2000,17(6):393－395.

The new scheme for solving relativistic quantum mechanics equations

LIU Ya-chao, LI Ming
(Department of Applied Physics,Xi'an University of Technology, Xi'an 710048,China)

Abstract: The new concept of the particle-antiparticle index is introduced into relativistic quantum mechanics. A new scheme for solving relativistic quantum mechanics equations is presented. The Dirac equation is resolved under the new scheme; and the difficulty about negative energy is cleared up. The wave-functions of free spinor particle and antiparticle coincided with quantum field Theory is obtained directly. At last the energy and momentum operators of antiparticle are redefined.
Key words: the particle-antiparticle index; relativistic quantum mechanics;negative energy;the negative energy solution

本文编辑:龚晓宁

☆

(上接第73页)

[8] 桂阳海,张勇,王焕新,等.气敏元件室温光激发气敏性能研究[J].电子元件与材料,2008,27(2):13－16.
[9] 高晓光,李建平,何秀丽,等.Si基膜片型气敏传感器微结构单元的热学性能[J].微细加工技术,2002(1):50－53,59.
[10] 曾文,林志东,高俊杰.金属离子掺杂纳米SnO_2材料的气敏性能及掺杂机理[J].纳米技术与精密工程,2008,6(3):174－178.
[11] 徐毓龙.金属氧化物气敏传感器[J].传感技术学报,1996(3):72－78.

Study of gas-sensing properties of Ag^+ -doped TiO_2 -SnO_2 composite nano materials

FU Ping, LIN Zhi-dong
(School of Materials Science and Engineering, Wuhan Institute of Technology,Wuhan 430074, China)

Abstract: TiO_2 and SnO_2 composite nano materials were prepared by sol-gel and doped by Ag^+, then were made as the heatertype gas sensors. The gas-sensing properties of gas sensors to volatile organic gases (VOCs) such as methanol and ethanol without light irradiation and under 313 nm Ultraviolet Light were studied respectively. The results show that UV irradiation can evidently raise conductivity of semiconductor and improve the sensitivity. The sensitivity for ethanol reach 62 at 240 ℃ which is 1.5 times of the value measured without light irradiation. And the sensitivity is 26.5 for 4.5×10^{-6}mol/L ethanol under UV while no light irradiation the value is only 9.5.

Key words: TiO_2; SnO_2; Ag^+-doped; ultraviolet light; gas sensitivity

本文编辑:龚晓宁