Май 1993 г. Том 163, № 5

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

ПАРАДОКС КЛЕЙНА И ДРОЖАЩЕЕ ДВИЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА В ПОЛЕ С ПОСТОЯННЫМ СКАЛЯРНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

С.В. Вонсовский, М.С. Свирский

(Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург; Челябинский государственный педагогический институт)

(*Статья поступила 26.10.92 г., после доработки 3.02.93 г.*)

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение. Как известно, еще в 1929г. Клейн [1] при решении релятивистского уравнения Дирака [2] сформулировал парадокс, который, как это отмечено, например, в [3] (см. также § 35 в [4], § 5 во 2-й части [5] и в [6]) является знаменитым примером трудностей дираковской квантовой теории релятивистского электрона. Этот парадокс связан с задачей объяснения процесса, происходящего при падении свободной электронной волны с положительной энергией на прямоугольную потенциальную ступеньку высотой U_0. Используя при этом обычное условие непрерывности волновой функции на барьере потенциала, приходим при достаточно большом значении U_0, удовлетворяющем условию

$$U_0 > E + m_0c^2, \tag{1}$$

где E — энергия, m_0 — масса покоя частицы и c — скорость света, к парадоксальному выводу, что отраженный от потенциальной ступеньки электронный поток превосходит падающий на нее поток. Необычайность этого вывода характеризуется, например, авторами монографии [3] такими словами: "Картина перестает соответствовать действительности".

Нам представляется, что парадокс Клейна можно разрешить, если учесть характерное для теории Дирака [2] "развязывание" известной из классической механики связи между импульсом и скоростью частицы. На это обстоятельство впервые обратил внимание Брейт [7] (см. также с. 550 в сб. трудов Паули [8]). По теории Дирака оператор v_z проекции скорости частицы на ее импульс (примем, что ось z направлена вдоль импульса) пропорционален не оператору p_z проекции импульса (что соответствовало бы равенству $p_z = mv_z$ классической механики), а матрице Дирака α_z (см., например, формулу (24) в §69 из [2]):

$$v_z = c\alpha_z. \tag{2}$$

Из (2) следует, что оператор v_z имеет собственные значения $\pm c$, ибо собственные значения матрицы Дирака равны ± 1. Этот результат, который, на первый взгляд, противоречит тому, что наблюдаемые на практике электроны имеют скорости по величине меньше скорости света, привел к представлению о дрожащем движении электрона. Это впервые показал Шрёдингер [9] (см. также [5,8] и др.). Дрожащую часть движения свободного электрона можно легко найти, если проинтегрировать квантовое уравнение движения для проекции скорости электрона, т.е. по (2) для матрицы α_z. Это уравнение движения имеет вид

$$i\hbar\dot{\alpha}_z = \alpha_z H_0 - H_0\alpha_z, \tag{3}$$

где $2\pi\hbar$ — постоянная Планка, точка сверху означает производную по времени t, а H_0 — гамильтониан свободной частицы (см. ниже формулу (6)). Легко показать (см., например, § 70 из [2]), что интегрирование (3) дает

$$\alpha_z = \frac{1}{2} i\hbar\,(\dot{\alpha}_z)_0\, e^{-2iH_0t/\hbar} H_0^{-1} + cp_zH_0^{-1} = \\ = \alpha_{z,\text{осц}} + \alpha_{z,\text{пост}}, \tag{4}$$

где $(\dot{\alpha}_z)_0$ — постоянная, равная значению $\dot{\alpha}_z$ при $t=0$. Таким образом, согласно (4), при свободном дви-

© С.В. Вонсовский, М.С. Свирский 1993

жении проекция скорости электрона на направление его импульса равна сумме осциллирующей $\alpha_{z\text{ осц}}$ и постоянной $\alpha_{z\text{ пост}}$ частей.

В работе [10] нами было показано, что дрожащему движению из (4) соответствует представление стационарного состояния электрона в виде суперпозиции двух собственных состояний оператора (2) с собственными значениями $+c$ и $-c$. При этом среднее значение оператора (2) дается равенством

$$\bar{v}_z = \frac{c^2 p_z}{E}. \tag{5}$$

Это выражение совпадает, согласно (2) и второму слагаемому в правой части (4), с собственным значением постоянной части оператора скорости $v_{z\text{ пост}}$. Из (5) также видно, что направления средней скорости и импульса совпадают только в стационарных состояниях с положительной энергией. В состояниях с отрицательной энергией они по (5) антипараллельны. Это последнее обстоятельство и приводит, как будет показано ниже, к разрешению парадокса Клейна. Однако сначала следует рассмотреть, как видоизменится дрожащее движение частицы в поле с постоянным скалярным потенциалом.

2. Дрожащее движение частицы в поле с постоянным скалярным потенциалом. При движении частицы с массой покоя m_0 в поле с постоянным отличным от нуля скалярным потенциалом U_0 гамильтониан Дирака имеет вид (см. формулу (23) в §69 из [2])

$$H = c\alpha_z p_z + \beta m_0 c^2 + U_0 = H_0 + U_0, \tag{6}$$

где α_z и β — матрицы Дирака, а H_0 — гамильтониан свободного движения, использованный выше в (3). Таким образом, при наличии постоянного скалярного потенциала для α_z выполняется равенство вида (4), в котором следует заменить H_0 на $H - U_0$. Поэтому вместо второго слагаемого в правой части (4) будем иметь

$$\alpha_{z,\text{пост}} = cp_z(H - U_0)^{-1}, \tag{7}$$

а вместо (5)

$$\bar{v}_z = \frac{cp_z}{E - U_0}; \tag{8}$$

здесь E — собственное значение гамильтониана (6), равное

$$E - U_0 = \pm(m_0^2 c^4 + c^2 p_z^2)^{1/2}. \tag{9}$$

В правильности (9) нетрудно убедиться, возводя в квадрат выражение $H - U_0$ из (6) и используя соотношения $\alpha_z\beta + \beta\alpha_z = 0$ и $\alpha_z^2 = \beta^2 = 1$, которым удовлетворяют матрицы Дирака (см. [2]). Из (8) и (9) видно, что, когда в правой части (9) стоит знак плюс, величины $\bar{v}_z$ и p_z имеют одинаковые знаки, а при знаке минус эти векторы антипараллельны. Из формул (8) и (9) также следует, что зависимость средней скорости и ее среднеквадратичной неопределенности $[(\Delta v_z)^2]^{1/2} = [c^2 - (\bar{v}_z)^2]^{1/2}$ от p_z и m_0 имеют внешне такой же вид, как и зависимость (5), и зависимость

$$\left[\overline{(\Delta v_z)^2}\right]^{1/2} = c\frac{m_0}{m}, \tag{10}$$

где m масса движущегося электрона, которые были впервые установлены нами в [10] (см. там формулу (12)) для случая свободного движения.

Из условия нормировки $W(c) + W(-c) = 1$ ($W(c)$ — вероятность состояния), в котором собственное значение скорости равно $+c$, а $W(-c)$ — вероятность состояния, где это значение равно $-c$, а также из сохранения зависимости среднего значения скорости $\bar{v}_z$ от p_z и m_0 (оно связано с вероятностями соотношением $\bar{v}_z = c(W(c) - W(-c))$) следует, что в поле с постоянным скалярным потенциалом сохраняются внешне те же зависимости, что получены в формулах (9) и (10) впервые в нашей работе [10] для вероятностей в случае свободного движения. Это согласуется с тем, что в соответствии с калибровочной инвариантностью добавление к гамильтониану постоянного потенциала эквивалентно умножению волновой функции на фазовый множитель $e^{-iU_0 t/\hbar}$ и, следовательно, это не должно менять вероятности состояний, суперпозиция которых образует, согласно [10], стационарное состояние частицы, движение которой описывается уравнением Дирака.

3. Разрешение парадокса Клейна. Обозначим область пространства с $z < 0$, в котором потенциал $U = 0$, номером 1, а область с $z > 0$, в которой потенциал $U = U_0 > 0$, номером 2. Тогда в области 1 положительная энергия по (9) равна $E - (m_0^2 c^4 + c^2 p_{1,z}^2)^{1/2}$, а в области 2 она определяется выражением (9) с импульсом $p_{2,z}$. При движении частицы в области 1, выполняется неравенство $p_{1,z}^2 > 0$, которое означает, что импульс $p_{1,z}$ вещественен. При этом только что приведенная выше энергия удовлетворяет неравенству $E > m_0 c^2$. Совместно с условием (1) это эквивалентно неравенству $U_0 > 2m_0 c^2$, а как известно из теории Дирака, энергетическая щель между уровнями с отрицательной и положительной энергиями равна $2m_0 c^2$. Поэтому это неравенство означает, что потенциальная энергия U_0 настолько велика, что под ее влиянием уровни энергии, которые при $U = 0$ были отрицательные, могут под влиянием U_0 подняться и оказаться в области положительных энергий, где $E > m_0 c^2$. Соответственно могут оказаться равными энергия в области 1 (см. формулу (9) в тексте выше) и энергия в области 2:

$E = U_0 - (m_0^2c^4 + c^2p_{2,z}^2)^{1/2}$, которая получается из (9) в случае знака минус в ее правой части. Тогда в случае выполнения неравенства (1) величина $p_{2,z}^2$ оказывается положительной и, следовательно, является вещественной. Поэтому при такой положительной энергии, при которой как $p_{1,z}$, так и $p_{2,z}$ являются вещественными, возможен переход из области 1 в область 2.

Рассмотрим теперь среднее значение проекции скорости на ось z в области 1 и в области 2. Если поток частиц направлен из области 1 в область 2, то в области 1 должно выполняться неравенство $\bar{v}_{1,z} > 0$. В этой же области 1, где электрон движется свободно, должно, согласно (5), выполняться равенство $\bar{v}_{1,z} = c^2p_{1,z}/E$. При положительной энергии E, согласно этому равенству, а также при выполнении только что приведенного в тексте неравенства для средней скорости должно также выполняться неравенство $p_{1,z} > 0$. Таким образом, в области 1 импульс параллелен средней скорости частицы и так же, как средняя скорость, направлен из области 1 в область 2.

В области 2 из (8) и (9) следует, что $\bar{v}_{2,z} = \pm c^2p_{2,z}(m_0^2c^4 + c^2p_{2,z}^2)^{-1/2}$. Поскольку в условиях парадокса Клейна рассматриваются положительные уровни энергии, которые возникли благодаря достаточно большой величине U_0 из отрицательных (при $U = 0$) уровней энергии, то следует в соответствии с (9) оставить в правой части только что приведенного выражения для $\bar{v}_{2,z}$ знак минус. Если теперь считать, что при переходе из области 1 в область 2 сохраняется направление импульса, т.е. $p_{2,z} > 0$, то получается, что $\bar{v}_{2,z} < 0$. Это означает, что в области 2 поток частиц направлен не из области 1 в область 2, а, наоборот, из области 2 в область 1, что и приводит к парадоксу Клейна (см. [2]).

Парадокс Клейна, как нам представляется, можно разрешить, если заранее не предполагать, что направление импульса $p_{2,z}$ совпадает с направлением импульса $p_{1,z}$. Такое предположение, которое обычно используется, соответствует нерелятивистской квантовой механике, согласно которой в случае плоской волны с волновым вектором k и импульсом $p = \hbar k$ направление плотности потока частиц совпадает с направлением импульса. Поэтому потоку частиц из области 1 в область 2 в нерелятивистской квантовой механике соответствует одинаковый знак проекции $p_{1,z}$ и $p_{2,z}$. В релятивистской же теории Дирака (см. формулы (2), (5) и (9)) аналогичной связи между плотностями тока и импульсом — нет. В этой теории, как это видно, например, из (5), при отрицательной энергии $E < 0$ знаки величин $\bar{v}_z$ и p_z оказываются противоположными. Поэтому на потенциальной ступеньке может происходить изменение не только величины, но и направления вектора импульса. Если поэтому при выполнении неравенства $p_{1,z} > 0$ положить $p_{2,z} < 0$, то из равенства, приведенного выше в тексте, для средней скорости в области 2 вытекает неравенство $\bar{v}_{2\,z} > 0$. При этом потоки частиц в области 1 и в области 2 оказываются параллельными и парадокс Клейна не возникает. Нетрудно также убедиться, что требования непрерывности решения уравнений Дирака на границе потенциальной ступеньки приводят при этом к равенствам

$$A_{\text{пад}} = \frac{1}{2}\left(1 + r\right) D_{\text{пр}},\; B_{\text{от}} = \frac{1}{2}\left(1 - r\right) D_{\text{пр}}\,,$$

где $A_{\text{пад}}$, $B_{\text{от}}$ и $D_{\text{пр}}$ — амплитуды падающей на ступеньку, отраженной от нее и прошедшей через нее плоских волн, а величина

$$r = \frac{p_{2,z}}{p_{1,z}}\left(E + m_0c^2\right)\left[U_0 - \left(E + m_0c^2\right)\right]^{-1}.$$

Соответственно выполняется равенство $\bar{v}_{z,\text{пад}} = |\bar{v}_{z,\text{от}}| + \bar{v}_{z,\text{пр}}$, из которого при $\bar{v}_{z,\text{пр}} > 0$ следует, что $|\bar{v}_{z,\text{от}}| < \bar{v}_{z,\text{пад}}$. Таким образом, восстанавливается картина, которая соответствует обычным представлениям о процессах отражения потока частиц от границ потенциальной ступеньки и прохождения через нее.

4. Выводы и обсуждение. В настоящей работе обобщены результаты исследования [10] на случай частицы в поле с постоянным скалярным потенциалом, отличным от нуля. Проведенное рассмотрение позволило естественным образом разрешить парадокс Клейна. В этой связи целесообразно сделать следующее замечание. До сих пор в физической литературе, как правило, высказывалось мнение, что вытекающий из теории Дирака вывод о равенстве собственных значений оператора скорости электрона соответствующем значениям $\pm c$, т.е. по величине равным скорости света, лишен физического смысла. Представляется, однако, что результаты, полученные нами как в п. 4 работы [10], так и в данной статье, указывают на глубокий физический смысл этого вывода теории Дирака. Следует при этом также отметить, что, полученные в [10] и здесь выводы относятся не только к истинно релятивистским быстро движущимся частицам, но также и к частицам с малыми по сравнению со скоростью света средними скоростями (этот случай можно реализовать переходом в соответствующую инерциальную систему отсчета). Для таких "нерелятивистских" частиц специальная теория относительности также приводит к существенно отличным от классической ньютоновской механики выводам, в частности к выводу о существовании энергии покоя. В этой связи отметим, что нами в работах [11, 12], а также другими авторами [13—15] в рамках зонной теории твердого тела установлено существование дрожащего движения и для существенно нерелятивистского электрона.

В случае свободного движения роль энергии покоя проявляется в том, что, как нами показано в формуле (12) из [10], среднеквадратичная неопределенность продольной импульсу проекции скорости электрона равна $(m_0c^2)\,c/E$. Соответственно эта неопределенность максимальна и равна c в системе покоя, где $E = m_0c^2$. В системе отсчета, где энергия электрона значительно превышает его энергию покоя, эта неопределенность стремится к нулю, а скорость электрона — к скорости света.

Согласно (2), (8) и (9) в поле с постоянным скалярным потенциалом неопределенность продольной импульсу проекции скорости определяется равенством

$$\left[\overline{(\Delta v_z)^2}\right]^{1/2} = \frac{m_0c^2}{|E - U_0|}\,c.$$

Таким образом, и в этом случае проявляется роль энергии покоя. При $U_0 = 0$ это выражение переходит в формулу (12) из [10], которую мы обсудили ваше. При выполнении условия (1) выражение для рассматриваемой неопределенности принимает только что указанный вид, из которого следует, что в рассмотренных в связи с парадоксом Клейна условиях с увеличением U_0 среднеквадратичная неопределенность продольной импульсу проекции скорости уменьшается.

В заключение отметим, что предложенное нами в работе [10] и развитое в данной статье представление стационарного состояния частицы в виде суперпозиции собственных состояний оператора скорости с собственными значениями этого оператора, равными $\pm c$, находится в полном соответствии с общим принципом суперпозиции состояний квантовой механики. В этом находит свое отражение внутреннее движение частиц с отличной от нуля массой покоя согласно релятивистской квантовой механике, что позволяет лучше понять природу частиц, движение которых подчиняется как законам квантовой механики, так и законам специальной теории относительности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Klein O.* // Zs. Phys. 1929. Bd. 53. S. 157.
2. *Дирак П.А.М.* Принципы квантовой механики. М.: Физматгиз, 1960.
3. *Бьеркен Дж.Д., Дрелл С.Д.* Релятивистская квантовая теория. Т.1: Пер. с англ. М.: Наука, 1978.
4. *Френкель Я.И.* Волновая механика. 4.2. Л.; М.: ОНТИ, 1934.
5. *Паули В.* Общие принципы волновой механики. М.; Л.: Гостехиздат, 1947.
6. *Мессиа А.* Квантовая механика. Т.2: Пер. с франц. М.: Наука, 1979.
7. *Breit G.* // Proc. Nat Acad. Sci. USA. 1928. V.I4. P. 535.
8. *Паули В.* Труды по квантовой механике. М.: Наука, 1975,
9. *Schrödinger E.* // Sitzungsber. Berlin Akad. 1930. S. 418.
10. *Вонсовский С.В., Свирский М.С.* // Проблемы теоретической физики. Сб. памяти И.Е. Тамма. М.: Наука, 1972. С. 389.
11. *Вонсовский С.В., Свирский М.С., Свирская Л.М.* // ТМФ, 1990.Т.85.С.211.
12. *Вонсовский С.В., Свирский М.С., Свирская Л.М.* // ТМФ. 1992.
13. *Cannata F., Ferrari L., Russo G.* II Sol. State Commun. 1990. V.74. P. 309.
14. *Ferrari L., Russo G.* // Phys. Rev. 1990. V. B42. P. 7454.
15. *Cannata F., Ferrari L.* // Phys. Rev. 1991. V, B44. P. 8599.