Лекция 14
Уравнение Клейна-Гордона-Фока

1 Обоснование уравнения Клейна-Гордона-Фока

Переход к релятивистскому описанию квантовых явлений связан с пересмотром целого ряда понятий, с которыми мы встречались при нерелятивистской формулировке квантовой механики. Прежде всего это связано с процессами рождения частиц. Напомним, что в нерелятивистской механике всегда полагается, что кинетическая энергия частиц $T \ll mc^2$. Однако если попытаться локализовать частицу в области, линейные размеры которой меньше комптоновской длинны волны $\hbar/(2mc)$, то в силу принципа неопределенностей частица будет иметь кинетическую энергию $T > 2mc^2$, т.е. станет сугубо релятивистской. Причем ее энергии будет достаточно, чтобы родить пару частица-античастица. Следовательно, на расстояниях меньше комптоновской длинны волны оказывается принципиально невозможно говорить об отдельной частице и следует учитывать процессы виртуального рождения и уничтожения пар.

Начнем знакомство с релятивистской квантовой механикой с примера свободной частицы со спином ноль. Прежде всего заметим, что уравнение Шредингера для свободной частицы

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{x},t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{x},t) \tag{1}$$

получается из соотношения

$$E = \frac{\vec{p}}{2m} \tag{2}$$

путем формальной замены

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vec{x}}. \tag{3}$$

Теперь рассмотрим релятивистское соотношеное между энергией и импульсом чстицы

$$\frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 - m^2c^2 = 0 \tag{4}$$

и произведем в нем замену (3). В результате получим

$$\frac{\hbar^2}{c^2}\cdot\frac{\partial^2\Psi(\vec{x},t)}{\partial t^2} - \hbar^2\Delta\Psi(\vec{x},t) + m^2c^2\Psi(\vec{x},t) = 0. \tag{5}$$

Это и есть уравнение Клейна-Гордона-Фока (КГФ).

2 Релятивистски-инвариантная запись уравнения КГФ

Запишем КГФ уравнение в релятивистски-инвариантном виде. Для этого введем контравариантный и ковариантный 4-векторы импульса

$$\begin{aligned} p^\mu &= (p^0,p^1,p^2,p^3) = \left(\frac{E}{c},p^1,p^2,p^3\right) \equiv \left(\frac{E}{c},\vec{p}\right), \\ p_\mu &= (p_0,p_1,p_2,p_3) = \left(\frac{E}{c},-p^1,-p^2,-p^3\right) \equiv \left(\frac{E}{c},-\vec{p}\right) \end{aligned} \tag{6}$$

и перепишем через них соотношение (4). В результате получим

$$\sum_{\mu=0}^{3} p^\mu p_\mu \equiv p^\mu p_\mu = m^2c^2. \tag{7}$$

Теперь определим ковариантный и контрвариантный 4-векторы координаты

$$\begin{aligned} x^\mu &= \left(x^0, x^1, x^2, x^3\right) = \left(ct, x^1, x^2, x^3\right) \equiv (ct, \vec{x}), \\ x_\mu &= (x_0, x_1, x_2, x_3) = (ct, x_1, x_2, x_3) \equiv (ct, -\vec{x}). \end{aligned} \tag{8}$$

Теперь по аналогии можно ввести операторы, которые имеют структуру 4-мерных контрвариантного и ковариантного векторов,

$$\begin{aligned} \hat{p}^\mu &= \left(\frac{i\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^3}\right) = i\hbar\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3}\right) \equiv \\ &\equiv i\hbar\frac{\partial}{\partial x_\mu} \equiv i\hbar\nabla^\mu \\ \hat{p}_\mu &= \left(\frac{i\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_3}\right) = i\hbar\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\frac{\partial}{\partial x^1}, -\frac{\partial}{\partial x^2}, -\frac{\partial}{\partial x_3}\right) \equiv \\ &\equiv i\hbar\frac{\partial}{\partial x^\mu} \equiv i\hbar\nabla_\mu \end{aligned} \tag{9}$$

Очевидно, что они имеют смысл операторов релятивистского (контрвариантного и ковариантного) импульса. Тогда из принципов соответствия следует, что релятивистское соотношение между 4-импульсом и массой частицы (7) в квантовом случае принимает вид следующего уравнения

$$\left[\hat{p}_\mu\hat{p}^\mu - (mc)^2\right]\Psi(x) = 0. \tag{10}$$

Подставляя сюда явное выражение для операторов импульса (9) убеждаемся, что это и есть уравнение КГФ.

3 Уравнение непрерывности и трудности с его интерпретацией

Отметим, что в отличии от уравнения Шредингера полученное уравнение является уравнением второго порядка по временной производной. Это означает, что для нахождения решения необходимо задать помимо значачения волновой функции в начальный момент времени, $\Psi(\vec{x}, t=0)$, еще и значение скорости изменеия волновой функции,
$Psi(\vec{x}, t=0)/\partial t$. Посмотрим к каким последствиям приведет это обстоятельство.

Получим уравнение непрерывности. С этой целью умножим слева уравнение КГФ (5) на $\Psi^*(\vec{x}, t)$

$$\hbar^2\Psi^*\left[c^2\cdot\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \hbar^2\Delta\right]\Psi == -m^2c^2\left|\Psi\right|^2. \tag{11}$$

Далее возмем уравнение сопряженное к уравнению КГФ умножим его слева на $\Psi(\vec{x}, t)$

$$\hbar^2\Psi\left\{\left[c^2\cdot\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \hbar^2\Delta\right]\Psi\right\}^* == -m^2c^2\left|\Psi\right|^2 \tag{12}$$

и отнимем получившееся уравнение от (11). В результате получим

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right)-\Delta\left(\Psi^*\Delta\Psi-\Psi\Delta\Psi^*\right)=0. \tag{13}$$

Вводя обозначения

$$\rho=\frac{i\hbar}{2mc}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right),\qquad \vec{j}=-\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*\right) \tag{14}$$

перепишем (13) в виде

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\mathrm{div}\vec{j}=0. \tag{15}$$

Хотя по внешнему виду это уравнение и похоже на уравнение непрерывности, тем не менее его нельзя интерпретировать как уравнение непрерывности. Дело в том, что величина $\rho(\vec{x},t)$, согласно с определением (14), не обязана быть положительно-определенной величиной и, следовательно, не может быть интерпретировона как плотность вероятности. В этом убедимся находя явное решение уравнения КГФ.

4 Положительно- и отрицательно-частотные решения

Будем решать уравнение (5) в виде плоских волн

$$\Psi(\vec{x},t)=A\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x}-\varepsilon t)\right\}. \tag{16}$$

Подставляя это выражение в уравнение КГФ (5) получим уравнение для ε

$$\varepsilon^2=m^2c^4+c^2\vec{p}^{\,2} \tag{17}$$

или

$$\varepsilon=\pm\sqrt{m^2c^4+c^2\vec{p}^{\,2}}=\pm E_{\vec{p}}, \tag{18}$$

где $E_{\vec{p}}>0$ и имеет смысл энергии частицы.

Таким образом имеем два решения

$$\Psi^{(+)}(\vec{x},t)=A\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x}-E_{\vec{p}}t)\right\} \tag{19}$$

и

$$\Psi^{(-)}(\vec{x},t)=A\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x}+E_{\vec{p}}t)\right\}. \tag{20}$$

Таким образом релятивистской уравнение КГФ имеет два решения, характеризуемые новым квантовым числом, $\varepsilon/E_{\vec{p}}=\pm1$. В зависимости от того, какой знак имеет эта величина будем называть решение положительно- и отрицательно-частотным решением.

Для того, чтобы придать физический смысл полученным решениям подстваим (19) и (20) в выражение для плотности $\rho(\vec{x},t)$. В результате получим, что для положительно-частотных решений плотность положительно определена, а для отрицательно-частотных решений отрицательно определена

$$\rho^{(+)}(\vec{x},t)=\frac{E_{\vec{p}}}{mc^2}\left|\Psi^{(+)}(\vec{x},t)\right|^2,\qquad \rho^{(-)}(\vec{x},t)=-\frac{E_{\vec{p}}}{mc^2}\left|\Psi^{(-)}(\vec{x},t)\right|^2. \tag{21}$$

Теперь, если переопределить плотность и ток (14) умножив их на элементарный заряд q_0, то эти величины можно теперь интерпретировать как плотность электрического заряда

$$\rho^{(+)}(\vec{x},t) = q_0 \frac{E_{\vec{p}}}{mc} \left|\Psi^{(+)}(\vec{x},t)\right|^2, \qquad \rho^{(-)}(\vec{x},t) = -q_0 \frac{E_{\vec{p}}}{mc} \left|\Psi^{(-)}(\vec{x},t)\right|^2 \tag{22}$$

и электрический ток

$$\vec{j}^{(+)}(\vec{x},t) = q_0 \frac{\vec{p}}{m} \left|\Psi^{(+)}(\vec{x},t)\right|^2, \qquad \vec{j}^{(-)}(\vec{x},t) = -q_0 \frac{-\vec{p}}{m} \left|\Psi^{(-)}(\vec{x},t)\right|^2. \tag{23}$$

При этом уравнение непрерывности (15) можно интерпретировать как уравнение непрерывности для электрического тока, а положительно- и отрицательно-частотные решения рассматривать как решения для частицы и античастицы. Отметим, что согласно (22) импульс аничастицы $\vec{p}\,'$ следует рассматривать как величину равную по абсолютному значению импульса частицы, но направленный в противоположную сторону, $\vec{p}\,' = -\vec{p}$.

5 Нерелятивистский предел

Для того, чтобы наша картина была полной, следует показать, что в нерелятивистском пределе уравнение КГФ сводится к уравнению Шредингера. С этой целью сделаем замену

$$\Psi(\vec{x},t) = \varphi(\vec{x},t) \exp\left[-\frac{imc^2}{\hbar}t\right]. \tag{24}$$

Теперь вычислим вторую производную от волновой функции по времени

$$\frac{\partial^2 \Psi(\vec{x},t)}{\partial t^2} = \exp\left[-\frac{imc^2}{\hbar}t\right] \left\{ \frac{\partial^2 \varphi(\vec{x},t)}{\partial t^2} - 2i\frac{mc^2}{\hbar}\frac{\partial \varphi(\vec{x},t)}{\partial t} - \frac{m^2c^4}{\hbar^2}\varphi(\vec{x},t) \right\}. \tag{25}$$

Чуть ниже мы увидим, что $\varphi(\vec{x},t)$ играет роль нерелятивистской волновой функции. Поэтому

$$\frac{\partial^2 \varphi(\vec{x},t)}{\partial t^2} \sim \hbar^2 T^2 \varphi(\vec{x},t), \tag{26}$$

где $T = E - mc^2$ — кинетическая энергия частицы. Таким образом в нерелятивистском пределе имеем

$$\frac{\partial^2 \Psi(\vec{x},t)}{\partial t^2} = \exp\left[-\frac{imc^2}{\hbar}t\right] \frac{mc^2}{\hbar} \left\{ -2i\frac{\partial \varphi(\vec{x},t)}{\partial t} - \frac{mc^2}{\hbar}\varphi(\vec{x},t) + \frac{1}{\hbar}\mathcal{O}\left(\frac{T^2}{m^2c^4}\right) \right\}. \tag{27}$$

Подставляя это выражение в уравнение КГФ получим в нижайшем порядке по T/mc^2 уравнение Шредингера для свободной частицы

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(\vec{x},t)}{\partial t} = -\hbar^2 \frac{\Delta}{2m}\varphi(\vec{x},t). \tag{28}$$