Wh: relativist. freies Teilchen

$$\circledast \quad E^{rel} = E_{kin}^{rel} = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$$

relativist. mechanischer Impuls

(Viererimpuls

$$p^\mu = (\underbrace{m_0 \gamma c}_{\text{Zeitl. Komponente}}, \underbrace{m_0 \gamma v}_{\text{3 räuml. Komponente}})$$

„relativist. mechanischer Impuls" p

$$= \left(\frac{E_{kin}^{rel}}{c}, p\right)$$

$$p^\mu p_\mu \overset{!}{=} m_0^2 c^2$$

nichtrelativistischer Grenzfall

$$v/c \ll 1$$

man kann zeigen: $E_{kin}^{rel} \longrightarrow \underbrace{m_0c^2}_{\text{Ruheenergie}} + \underbrace{\frac{1}{2}m_0 v^2}_{\text{Ausdruck aus der nicht-relativist. Mechanik}}$

Aus $\circledast$ folgt die Dispersionsrelation ($E = \hbar\omega$, $p = \hbar k$)

$$\hbar\omega = \sqrt{\hbar^2 k^2 c^2 + m_0^2 c^4} \qquad \sim k \quad \text{linear in der Wellenzahl}$$

Frage: Neue Bewegungsgleichung für quantenmechanische Zustände??

Benutze jetzt Korrespondenzregeln:

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad , \quad p \to \frac{\hbar}{i}\nabla$$

1. Versuch

nehme $\circledast$ und setze einfach die Korrespondenzregeln ein (und wende auf Zustand $\psi = \psi(\underline{r}, t)$ an)

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \sqrt{m_0^2c^4 - \hbar^2c^2\Delta}\,\psi$$

nicht akzeptabel, da der Differentialoperator unter der Wurzel vorkommt
$\to$ nicht definiert!

2. Versuch

quadriere $\circledast$ zunächst

$$E^2 \left(= (E_{kin}^{rel})^2\right) = p^2c^2 + m_0^2c^4$$

jetzt wieder: $E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$, $p \to \frac{\hbar}{i}\nabla$

$$\boxed{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)^2\psi = \left(m_0^2c^4 - \hbar^2c^2\Delta\right)\psi} \qquad \text{mit } \psi = \psi(\underline{r}, t)$$

Dividiere durch $\left(-\hbar^2 c^2\right)$

$$\Rightarrow \left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}\right)\psi(\underline{r},t) = 0$$

Benutze noch Def. des d'Alembert-Operator

$$\Box = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$$

$$\Rightarrow \boxed{\left(\Box + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}\right)\psi(\underline{r},t) = 0}$$

Klein-Gordon-Gleichung

(KG-Gleichung)

Bemerkung:

die Größe $\frac{\hbar}{m_0 c} = \lambda_c$ heißt Compton-Wellenlänge

(sie ist relevant bei der Streuung von relativistischen quantenmechan. Teilchen)

Diskussion

a) Die KG ist eine partielle Differentialgleichung (DGL)

Zweiter Ordnung in der Zeit

(im Unterschied zur (nicht-relativist.) Schrödingergl.; diese ist 1. Ordnung in der Zeit!)

$\Rightarrow$ Zur Lösung benötigt man sowohl $\psi(t=0)$ als auch $\dot{\psi}(t=0)$!

b) Die KG-Gleichung ist auch zweiter Ordnung bzgl. des Ortes!! (genau wie Schrödingergleichung)

$\Downarrow$

Die KG-Gleichung ist "Lorentz invariant"

d.h. sie ändert sich nicht bei einem Wechsel des Inertialsystems

Formale Begründung:

d'Alembert-Operator $\Box = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$

Kann geschrieben werden als Vierer-Skalarprodukt!

benutze: $\partial^\mu = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\nabla\right)$ „Kontravariant"

$\partial_\mu = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \nabla\right)$ „Kovariant"

$$\partial^\mu \partial_\mu = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta = \Box$$

Interpretation: $\Box$ ist Vierer-Skalarprodukt und ist damit lorentzinvariant!

Der Term $\left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2$ ist ebenfalls ein Skalar und damit lorentzinvariant

$\Rightarrow$ die KG-Gleichung ist lorentzinvariant, falls ψ ein "Lorentz-skalar" ist

c) Für $m_0 \to 0$ reduziert sich die KG-Gleichung formal auf die bekannte Wellengleichung aus der Elektrodynamik

$(\Box \psi = 0)$

d) Unklar: Wie kann man in diese Gleichung einen Spin (oder allg. Drehimpuls) einbeziehen?

Erinnerung an nicht-relativist. QM: Spin $\hat{=}$ Drehimpuls mit Quantenzahl $l_s = s = \frac{1}{2}$ ($m_s = \pm\frac{1}{2}$)

Dieser wird in den Hamiltonian eingebaut über Kopplungsterm.

$$\hat{H} \to \hat{H} - \hat{\mu}\cdot B$$

z.B. Wasserstoffatom

Operator des magnet. Moments zu diesem Drehimpuls! $\hat{\mu} \sim \underline{\hat{S}}$

Problem: Kopplungsterm $\underline{\mu}\cdot\underline{B}$ kann nicht als Skalarprodukt von Vierervektoren geschrieben werden!

$\Rightarrow$ Zusatzterm der Form $-\underline{\mu}\cdot\underline{B}$ würde die Lorentz-Invarianz verletzen

Folgerung: Die KG-Gleichung wird benutzt für Teilchen mit Spin $s=0$

(z.B. π-Mesonen)

(eignet sich nicht zur Behandlung des Spins des Elektrons)

e) Erfüllung der Kontinuitätsgleichung

Erinnerung: klassische Elektrodynamik

$\rho(\underline{r},t)$ Ladungsdichte, $\underline{j}(\underline{r},t)$ (Ladungs-)Stromdichte

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\underline{r},t)+\nabla\cdot\underline{j}(\underline{r},t)=0$$

Drückt die Erhaltung der Gesamtladung aus!

(Bemerkung:

$\partial_\mu j^\mu=0$ mit $j^\mu=(\rho c, \underline{j})$ (Lichtgeschw.)

Lorentzinvarianz!

nicht-relativist. Quantenmechanik:

$\rho(\underline{r},t)$ Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

$\underline{j}(\underline{r},t)$ Wahrsch.-Stromdichte

aus Schrödingergl. folgt:

$$\rho(\underline{r},t)=\psi^*(\underline{r},t)\,\psi(\underline{r},t)$$

$$\underline{j}(\underline{r},t)=\frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)$$

Frage: Erfüllt auch die KG-Gleichung eine Kontinuitätsgleichung

$$\left(\Box + \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi = 0$$

$$\Rightarrow \partial_\mu \partial^\mu \psi = -\frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\psi \qquad \Big|\cdot\psi^*$$

$$① \quad \psi^* \partial_\mu \partial^\mu \psi = -\frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\psi^*\psi$$

analog: betrachte die komplex konjugierte KG-Gleichg:

$$\partial_\mu \partial^\mu \psi^* = -\frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\psi^* \qquad \Big|\cdot\psi$$

$$② \quad \psi \partial_\mu \partial^\mu \psi^* = -\frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\psi\psi^*$$

Bilde Differenz (① − ②)

$$\psi^* \partial_\mu \partial^\mu \psi - \psi \partial_\mu \partial^\mu \psi^* = 0$$

Benutze inverse Kettenregel

$$\partial_\mu\left(\psi^*(\partial^\mu\psi)\right) - \cancel{(\partial_\mu\psi^*)(\partial^\mu\psi)} - \partial_\mu\left((\partial^\mu\psi^*)\psi\right) + \cancel{(\partial^\mu\psi^*)(\partial_\mu\psi)} = 0$$

es gilt: $(\partial_\mu\psi^*)(\partial^\mu\psi) = (\partial^\mu\psi^*)(\partial_\mu\psi)$

$\Rightarrow$ 2. und 4. Term heben sich auf!

$$\Rightarrow \partial_\mu\left(\psi^*(\partial^\mu\psi)\right) - \partial_\mu\left((\partial^\mu\psi^*)\psi\right) = 0$$

Dies entspricht einer Kontinuitätsgleichg ($\partial_\mu j^\mu = 0$), wenn wir definieren

$$j^\mu \sim \psi^*\partial^\mu\psi - \psi\partial^\mu\psi^* \qquad \text{Vorzeichen!}$$

nur bestimmt bis auf Vorfaktor

Wähle Vorfaktoren nach Konvention (und benutze $\partial^\mu = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\nabla\right)$)

Es ergibt sich:

räuml. Komponenten: $\underline{j} = \frac{\hbar}{2im_0}\left(\psi^* \nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right)$

zeitliche Komponente: $\rho = \frac{i\hbar}{2m_0 c^2}\left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} - \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right)$

Also:

$\underline{j}$ sieht aus wie in der nicht-relativist. QM (Schrödinger-Theorie)

aber: $\rho(\underline{r},t)$ sieht anders aus!

enthält sowohl ψ als auch $\dot{\psi}$!

Folgerung: $\rho(\underline{r},t)$ kann u.U. negativ werden!

Denn: KG-Gleichung zweiter Ordnung in der Zeit

$\Rightarrow$ Anfangsbedingungen für ψ und $\dot{\psi}$

$\Rightarrow$ es kann nicht ausgeschlossen werden, dass ρ negativ wird!

(Unterschied Schrödinger-Theorie: $\rho(\underline{r},t) = \psi^*(\underline{r},t)\psi(\underline{r},t)$
$= |\psi|^2$ positiv!

$\Rightarrow$ Wir können die oben definierte Größe $\rho(\underline{r},t)$ nicht einfach als raum-zeitliche Wahrscheinlichkeitsdichte auffassen

f) Lösungen der KG-Gleichung für freies Teilchen

$$\left(\Box + \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2\right)\psi = 0 \qquad \text{mit } \psi = \psi(\underline{r},t)$$

Lösungsansatz: $\psi(\underline{r},t) = \psi_0 e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)}$ ebene Welle

(oder Superposition davon)

da KG-Gleichung (wie auch Schrödinger-Gl.) linear in ψ!

Einsetzen

$$\left(\Box + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}\right)\psi = \left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}\right)\underbrace{\psi_0 e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)}}$$

$$= \left(-\frac{\omega^2}{c^2} + (\underline{k})^2 + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}\right)\psi \overset{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow \omega^2 = c^2\left((\underline{k})^2 + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}\right)$$

$$\Rightarrow \omega = \pm c\sqrt{(\underline{k})^2 + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}}$$

bzw. $\hbar\omega = \pm c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}$ mit $p = \hbar \underline{k}$

(entspricht $E = \hbar\omega = \pm c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}$)

positive Lösung konsistent mit unserem Ausdruck für die relativist. Energie–Impuls-Beziehung!

Es gibt also in der KG-Theorie formal immer zwei Lösungen, eine mit positiver Energie und eine mit negativer Energie!

Ladungsinterpretation der KG-Gleichung

Wir haben gesehen:

- Die durch Kontinuitätsgleichung nahegelegte Dichte ρ kann auch negativ werden
- Die KG-Gleichung für freie Teilchen besitzt Lösungen mit $E = \pm\sqrt{p^2 + m_0^2 c^4}$

Interpretations-Ausweg:

Wir betrachten statt $\rho(\underline{r},t)$ die "Ladungsdichte"

$$\rho'(\underline{r},t) = e_0\,\rho(\underline{r},t) = \frac{i\hbar e_0}{2m_0c^2}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)$$

e_0 : Elementarladung

Beispiel freies Teilchen $\quad (\underline{p} = \hbar\underline{k},\ E = \hbar\omega)$

Lösung $\quad \psi_\pm(\underline{r},t) = A_\pm\, e^{i/\hbar(\underline{p}\cdot\underline{r} \mp |E|t)}$

mit $\quad |E| = +\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$

Betrachte $\rho'(\underline{r},t)$

$$\rho'_\pm(\underline{r},t) = \pm\frac{e_0|E|}{m_0c^2}\left(\psi_\pm^*(\underline{r},t)\,\psi_\pm(\underline{r},t)\right)$$