Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Matierie

Klein-Gordon-Gleichung

Judith Beier

17.12.2014

Inhaltsverzeichnis

1 Einblick in die Geschichte der relativistischen Quantenmechanik **3**

2 Spezielle Relativitätstheorie **3**
2.1 Relativistische Kinematik 4
2.2 Metrik 4
2.3 Lorentztransformation 5
2.4 Energie-Impuls-Beziehung 5

3 Schrödingergleichung **7**
3.1 zeitabhängige Schrödingergleichung für das freie Teilchen 7
3.2 Lorentz-Invarianz der Schrödingergleichung? 7

4 Klein-Gordon-Gleichung **7**
4.1 Herleitung 7
4.2 Freies Teilchen 9
4.3 Geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld 10

5 Zusammenfassung **11**

1 Einblick in die Geschichte der relativistischen Quantenmechanik

Albert Einstein stellte im Jahr 1905 die spezielle Relativitätstheorie auf. Anschließend im Jahr 1915 stellte er auch die Allgemeine Relativitätstheorie vor. Die Schrödingergleichung (SG) wurde 1925 aufgestellt, obwohl die ART zuvor experimentell anhand der Rotverschiebung des Weißen Zwergs Sirius B bestätigt wurde und die SG nicht lorentzinvariant ist. Daraufhin versuchten die Physiker, eine quantenmechanische Gleichung zu finden, die mit der ART vereinbar ist. 1926 stellten die Physiker Klein und Gordon die Klein-Gorden-Gleichung (KG) auf. Diese wurde zunächst verworfen, da Wahrscheinlichkeitsdichte nicht positiv definit ist und negative Energien nicht interpretiert werden konnten. Erst die Physiker Feynman und Stückelberg interpretierten die negativen Energien als Lösungen von Teilchen mit inverser Ladung. Die KG kann nur für Teilchen ohne Spin verwendet werden. Im Jahr 1928 stellt Dirac-Gleichung die nach ihm benannte Gleichung auf. Diese behandelt auch Teilchen mit Spin.

2 Spezielle Relativitätstheorie

Axiome von Einstein

1. **Äquivalenzprinzip:** Die physikalischen Gesetze sind in allen Bezugssystemen gleich.
2. **Konstanz der Lichtgeschwindigkeit:** Die Lichtgeschwindigkeit c ist in allen Inertialsystemen gleich. Sie ist die maximale Geschwindigkeit.

2.1 Relativistische Kinematik

Vierervektoren Die Vierervektoren haben in der ersten Zeile eine Zeitkomponente, danach folgen die drei Ortskomponenten. Es wird zwischen kovarianten und kontravarianten Vektoren unterschieden. Bei kontravarianten Vektoren ist die Ortskomponente positiv, bei den kovrianten negativ.

- **kontravariant**

$$x^\mu = \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

- **kovariant**

$$x_\mu = \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ct \\ -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix}$$

Im Allgemeinen laufen griechische Indizes über $0, 1, 2, 3$, im Gegensatz dazu laufen lateinische Indizes über $1, 2, 3$.

2.2 Metrik

Kovarianten und kontravariante Vektoren können mit Hilfe des metrischen Tensors g ineinander umgewandelt werden.

$$\begin{aligned} x_\mu &= g_{\mu\nu} x^\nu \\ x^\mu &= g^\mu_\nu x^\nu \end{aligned}$$

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Es wird also das Vorzeichen der Ortskomponenten umgedreht. Werden kovariante in kovariante (bzw. kontravariante in kontravariante) Vektoren umgewandelt, so wird lediglich mit der Einheitsmatrix multipliziert.

$$g^\mu_\nu = I_4.$$

Skalarprodukt und Norm Das Skalarprodukt ist definiert durch die Multiplikation eines kovarianten mit einem kontravarianten Vektor:

$$\begin{aligned} x.y = x_\mu y^\mu &= x_0 y^0 - x_1 y^1 - x_2 y^2 - x_3 y^3 \\ &= x^\mu y_\mu. \end{aligned}$$

Die Norm $x^2 = x_\mu x^\mu$ ist das Skalarprodukt eines Vektors mit sich selbst.

2.3 Lorentztransformation

Gesucht wird eine lineare, reelle Transformation

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x' \end{pmatrix} = \Lambda \begin{pmatrix} ct \\ x \end{pmatrix},$$

- die die Norm $x'^{\mu}x'_{\mu} = x^{\mu}x_{\mu}$ erhält.
- für die $\Lambda^T g \Lambda = g$ gilt.

Der Übersicht halber wird im Allgemeinen ab jetzt nur noch eine Raumkomponente betrachtet. Die Verfahren lassen sich aber problemlos auf drei Raumdimensionen erweitern.

Einträge der Transformationsmatrix Ausgehend von der Erhaltung der Norm $x'^{\mu}x'_{\mu} = x^{\mu}x_{\mu}$ ergibt sich:

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\beta \\ -\gamma\beta & \gamma \end{pmatrix} \text{ mit } \beta = \frac{v}{c} \text{ und } \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

Daraus ergeben sich die Transformationsgleichungen:

$$\begin{aligned} t' &= \gamma(t - \frac{v}{c^2}x) \\ x' &= \gamma(x - vt) \end{aligned}$$

2.4 Energie-Impuls-Beziehung

Vierergeschwindigkeit Die Eigenzeit τ ist die Zeit, die direkt an einer Uhr an einem Ort abgelesen werden kann. Es können Aussagen über Zeitintervalle gemacht werden. Es gilt: $\frac{\mathrm{d}\tau}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\gamma}$. Daraus ergibt sich die Vierergeschwindigkeit als Ableitung der Vierervektoren nach der Zeit.

$$u^{\mu} = \frac{\mathrm{d}x^{\mu}}{\mathrm{d}\tau} = \begin{pmatrix} c\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}\tau} \\ \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau} \end{pmatrix} = \gamma \begin{pmatrix} c \\ \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} \end{pmatrix} = \gamma \begin{pmatrix} c \\ v \end{pmatrix}$$

Die Norm der Vierergeschwindigkeiten ist im Allgemeinen die Lichtgeschwindigkeit zum Quadrat:

$$u^2 = (u^0)^2 - (\vec{u})^2 = \frac{1}{1-\beta^2}(c^2 - v^2) = c^2$$

Viererimpuls Der Viererimpuls kann analog zum klassischen Fall als Produkt von Masse und Vierergeschwindigkeit definiert werden. Gleichzeitig kann er aber auch als Energie in der nullten Komponente und dem relativistischen Ortsimpuls in den folgenden Komponenten.

$$p^\mu = mu^\mu = \gamma m \begin{pmatrix} c \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E}{c} \\ p \end{pmatrix}$$

Über die Norm des Viererimpulses $p^2 = p^\mu p_\mu = m^2 u^2 = m^2 c^2$ wird die relativistische Energie-Impuls-Beziehung erhalten:

$$\begin{aligned} (p^0)^2 &= m^2c^2 + p^2 && | \cdot c^2 \\ c^2(p^0)^2 &= m^2c^4 + c^2p^2 && |\sqrt{\dots} \\ cp^0 &= \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} := E. \end{aligned}$$

3 Schrödingergleichung

3.1 zeitabhängige Schrödingergleichung für das freie Teilchen

Als Ausgangpunkt für die Herleitung der SG wird die klassische Energie-Impuls-Beziehung genutzt:

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

Die Energie und der Impuls gehen über zu Operatoren, die auf die Wellenfunktion angewendet werden:

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \text{ und } p \to -i\hbar\nabla$$

Werden diese Operatoren in die klassische Energie-Impuls-Beziehung eingesetzt, wird die SG erhalten.

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi.$$

3.2 Lorentz-Invarianz der Schrödingergleichung?

Wie anfangs schon erwähnt, ist die SG nicht lorentzinvariant, d.h. nicht invariant unter der Transformation

$$t' = \gamma(t - \frac{v}{c^2}x)$$
$$x' = \gamma(x - vt)$$

Wähle als Ansatz für die Wellenfunktion:

$$\Psi(x', t') = e^{\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

Wird das in die SG

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi$$

eingesetzt, so ist leicht zu erkennen, dass diese Gleichung nicht lorentzinvariant ist, da die Ableitungen in verschiedenen Ordnungen auftreten. Das Ziel soll im folgenden Kapitel sein, eine quantenmechanische Gleichung zu finden, die unter Lorentztransformation invariant bleibt.

4 Klein-Gordon-Gleichung

4.1 Herleitung

Analog zur SG ist der Ausgangspunkt für die KG die Energie-Impuls-Beziehung - hier aber die relativistische:

$$p_\mu p^\mu = m^2c^2 \Leftrightarrow E^2 = c^2p^2 + m^2c^4. \tag{1}$$

Beim Übergang zu Operatoren geht in der linken Gleichung 1 der Viererimpuls in den Differentialoperator über:

$$p^\mu \to i\hbar\partial^\mu = i\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial ct} \\ \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}.$$

Eingesetzt in Gleichung 1 ergibt sich die Klein-Gordon-Gleichung für das freie Teilchen:

$$\left(-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\Psi(x,t) = 0.$$

Lorentzinvararianz der Klein-Gordon-Gleichung Nun soll explizit nachgerechnet werden, dass die KG lorentzinvariant ist. Dieser Teil beeinträchtigt das Verständnis der folgenden Abschnitte nicht, sodass er auch übersprungen werden kann. Betrachte Ort und Zeit in einem bewegten Bezugssystem. Dann gilt:

$$\begin{aligned} t' &= \gamma(t - \frac{v}{c^2}x) \\ x' &= \gamma(x - vt). \end{aligned}$$

Wähle als Ansatz für die Wellenfunktion eine ebene Welle:

$$\begin{aligned} \Psi(x',t') &= e^{i(\omega t' - kx')} && (2) \\ &= e^{i\gamma(\omega t - \frac{\omega v}{c^2}x - kx + kvt)} && (3) \\ &= e^{i\gamma((\omega+kv)t - (k+\frac{\omega v}{c^2})x)}. && (4) \end{aligned}$$

Wird dies in die KG eingesetzt, so sollte sie bei Lorentzinvarianz immernoch erfüllt sein.

Beweis. Es gilt zu zeigen, dass

$$\left(-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\Psi(x',t') = 0$$

ist. Bekannt ist, dass

$$\left(-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\Psi(x,t) = 0.$$

ist. Setze nun den Ansatz der ebenen Wellen 4 ein:

$$
\begin{aligned}
&\left(-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}+\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)e^{i\gamma((\omega+kv)t-(k+\frac{\omega v}{c^2})x)}\\
&=\left[\frac{\gamma^2}{\hbar^2c^2}(E+pv)^2-\frac{\gamma^2}{\hbar^2}(p+\frac{Ev}{c^2})^2-\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right]\Psi(x',t')\\
&=\frac{\gamma^2}{\hbar^2c^2}\left[E^2+2Epv+p^2v^2-(p^2c^2+2Epv+\frac{E^2v^2}{c^2})-\frac{m^2c^4}{\gamma^2}\right]\Psi(x',t')\\
&=\frac{\gamma^2}{\hbar^2c^2}\left[\underbrace{p^2(v^2-c^2)}_{=\frac{c^2p^2}{\gamma^2}}+\underbrace{E^2(1-\frac{v^2}{c^2})}_{=\frac{E^2}{\gamma^2}}-\frac{m^2c^4}{\gamma^2}\right]\Psi(x',t')\\
&=\frac{\gamma^2}{\hbar^2c^2}\left[p^2(v^2-c^2)+\frac{1}{\gamma^2}\underbrace{E^2}_{=p^2c^2+m^2c^4}-\frac{m^2c^4}{\gamma^2}\right]\Psi(x',t')\\
&=\frac{1}{\hbar^2c^2}[-c^2p^2+p^2c^2+m^2c^4-m^2p^4]\\
&=0
\end{aligned}
$$

□

Bemerkung 4.1. Die Klein-Gordon-Gleichung ist nur für Teilchen ohne Spin geeignet.

4.2 Freies Teilchen

Für das freie Teilchen wird als Ansatz die ebene Welle gewählt:

$$\Psi(x,t)=e^{\frac{i}{\hbar}(Et-px)}$$

Eingesetzt in die KG ergibt sich

$$\left[\frac{1}{c^2\hbar^2}E2-\frac{1}{\hbar^2}p^2-\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right]\Psi(x,t)=0.$$

Hieraus ergeben sich die Energieeigenwerte

$$E=\pm\sqrt{p^2c^2+m^2c^4}.$$

Auffällig sind die positiven und negativen Energieeigenwerte. Die Interpretation wird deutlich, wenn ein Teilchen im elektromagnetischen Feld betrachtet wird. Dies soll Gegenstand des nächsten Abschnitts sein. Wird davon ausgegangen, dass Energien E immer positiv definit sind, ergeben sich für die Eigenfunktionen:

$$\Psi^{(\pm)}(x,t)=e^{\pm\frac{i}{\hbar}(Et-px)}.$$

4.3 Geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld

Betrachtet wird die Darstellung der Felder über die elektromagnetischen Potenziale:

$$\vec{E} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} \ ; \ \vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

Der Impuls eines geladenen Teilchens beitzt zusätzlich einen Anteil durch die Wechselwirkung mit dem elektromagnetichen Feldes:

$$\vec{p} \to \vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}. \tag{5}$$

Auch für das Vektorpotenzial gibt es eine Darstellung in Vierervektoren:

$$A^\mu = \begin{pmatrix} \Phi \\ \vec{A} \end{pmatrix}$$

Dadurch kann der gesamte Impuls in Vierervektoren dargestellt werden:

$$p^\mu \to p^\mu - \frac{q}{c}A^\mu = \begin{pmatrix} E/c - q/c \cdot \Phi \\ \vec{p} - q/c \cdot \vec{A} \end{pmatrix}.$$

Beim Übergang zu Operatoren wird der Impuls erneut durch den Differentialoperator ersetzt.

$$p^\mu \to \begin{pmatrix} i\hbar\frac{\partial}{\partial ct} - q\Phi \\ -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - \frac{q}{c}A \end{pmatrix}$$

Wird diese in die relativistische Energie-Impuls-Beziehung eingesetzt, ergibt sich die KG für ein geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld:

$$\begin{aligned} & p^\mu p_\mu = m^2c^2 \\ \Rightarrow & \left[\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial ct} - q\Phi\right)^2 - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - \frac{q}{c}A\right)^2 - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right]\Psi(x,t) = 0. \end{aligned}$$

Das Ziel soll nun sein, die Vorzeichen der Energieeigenwerte für das freie Teilchen zu interpretieren. Daher werden als Ansatz die Eigenfunktionen für das freie Teilchen gewählt:

$$\Psi^{(\pm)}(x,t) = e^{\pm\frac{i}{\hbar}(Et-px)}.$$

Wird dies in die KG eingesetzt, wird folgende Form erhalten:

$$\left[\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial ct} \pm q\Phi\right)^2 - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \pm \frac{q}{c}A\right)^2 - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right]\Psi^{(\pm)}(x,t) = 0$$

Es wird erkannt, dass positive und negative Energielösungen mit Lösungen von Teilchen und den entsprechenden Antiteilchen korrespondieren.

5 Zusammenfassung

Zu Beginn wurde gezeigt, dass die SG nicht lorentzinvariant ist. Dies war der Anlass, ausgehend von der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung durch Übergang zu Operatoren zur Klein-Gordon-Gleichung zu gelangen. Im Gegensatz zur SG ist die KG lorentzinvariant. Es gibt zwei Lösungen der KG für das freie Teilchen: eine mit positivem und eine mit negativem Energieeigenwert. Diese Lösungen können interpretiert werden als Teilchen und entsprechendes Antiteilchen mit gleicher Masse m, gleicher positiver Energie E, aber anderem Vorzeichen der Ladung q. Im Gegensatz zur Diracgleichung liefert die KG nur für Teilchen ohne Spin Ergebnisse.

Literatur

[1] M. Klasen, Mécanique Quantique Relativiste, Dunod, Paris, 2009

[2] R. H. Landau, Quantum Mechanics II, John Wiley & Sons, Inc., 1990