Klein-Gordon-Gleichung

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

c Lichtgeschw., p relativist. mechan. Impuls
m_0 Ruhemasse

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

quadriere zunächst: $E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$

$$\Rightarrow \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)^2 \psi = \left(m_0^2c^4 - \hbar^2c^2\Delta\right)\psi$$

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

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

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

Klein-Gordon-Gleichung (KG)

Bemerkung:

Die Größe $\frac{\hbar}{m_0 c} = \lambda_C$ heißt Compton-Wellenlänge

(sie spielt eine Rolle bei der relativist. Streuung von quantenmechan. Teilchen)

Weitere Diskussion der KG-Gleichung

a) Die KG-Gleichung ist eine partielle DGL <u>zweiter</u> Ordnung in der Zeit

$\Rightarrow$ Zur Lösung benötigt man nicht nur $\psi(t=0)$
sondern auch $\dot{\psi}(t=0)$

Die (nicht-relativistische) Schrödingergl. ist dagegen erster Ordnung in der Zeit!
$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi\right)$

b) Die KG-Gleichung ist "Lorentz-invariant", d.h. sie ändert sich nicht bei einem Wechsel des Inertialsystems

Lorentzinvarianz $\hat{=}$ man kann die Gleichung durch Skalarprodukte von Vierervektoren und einfach Skalare ausdrücken

Begründung

$$\Box = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \underbrace{=}_{\text{läßt sich schreiben als}} \partial^\mu \partial_\mu \quad \text{mit} \quad \partial^\mu = (\underbrace{\tfrac{1}{c}\tfrac{\partial}{\partial t}}_{\text{Zeitl. Komponente}}, \underbrace{-\nabla}_{\text{räuml. Komponent}})$$

$$= \partial_\mu \partial^\mu \qquad \partial_\mu = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \nabla\right) = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \partial_x, \partial_y, \partial_z\right)$$

$\Rightarrow \Box$ ~~ist~~ entspricht einem Vierer-Skalarprodukt und ist damit lorentzinvariant!

Der ~~Ter~~ Term $\left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2$ in der KG-Gleichung ist ebenfalls Skalar und ist damit automatisch invariant

$\Rightarrow$ KG-Gl. ist lorentzinvariant, falls ψ ~~ein~~ ein Skalar ist

Beachte:

Für $m_0 \to 0$ reduziert sich die KG-Gleichung auf $\Box\psi = 0$

bekannte Wellengleichung aus der Elektrodynamik

c) Berücksichtigung des Spins ... ??

Erinnerung an die nicht-relativist. Quantenmechanik

Spin des Elektrons $\hat{=}$ Drehimpuls mit Drehimpulsquantenzahl $l = s = \frac{1}{2}$

Drehimpuls wird im Hamiltonoperator "eingebaut" über

$$\hat{H} \longrightarrow \hat{H} - \hat{\underline{\mu}} \cdot \underline{B}$$

magnetisches Feld (extern)

Operator des magnetischen Moments. Dieser Operator ist proportional zum Drehimpuls

$\hat{\underline{\mu}} \sim \hat{\underline{\Sigma}}$ (hier: $\hat{\underline{\Sigma}} = \hat{\underline{S}}_{\text{Spin}}$)

Formulierung der

Problem bei der Relativist. QM:

$\hat{\underline{\mu}} \cdot \underline{B}$ kann nicht als Skalarprodukt von Vierervektoren geschrieben werden

$\Rightarrow$ Zusatzterm der Form $-\hat{\underline{\mu}} \cdot \underline{B}$ in der KG-Gleichung würde die Lorentzinvarianz ~~verletzen~~ !

Schlussfolgerung: Die KG-Gleichung ist eine Gleichung für Teilchen mit Spin $S=0$, aber sie ist nicht geeignet für Teilchen mit Spin $\neq 0$ (z.B. Elektronen)

z.B. π-Mesonen

d) Erfüllung der Kontinuitätsgleichung

Erinnerung ①: Klass. Elektrodynamik.

$$\frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\rho(\underline{r},t)}_{\text{Ladungsdichte}} + \nabla \cdot \underbrace{\underline{j}(\underline{r},t)}_{\text{Stromdichte}} = 0$$

Drückt Erhaltung der Gesamtladung $Q \sim \int d\underline{r}\, \rho(\underline{r},t)$ aus

(relativistisch: $\partial_\mu j^\mu = 0$
mit $\partial_\mu = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \nabla\right)$, $j^\mu = (\rho c, \underline{j})$

$\Rightarrow$ Kontinuitätsgleichung ist lorentzinvariant!)

Erinnerung ②: nicht-relativist. QM (Schrödinger)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi$$

Kontinuitätsgleichung gilt für folgende Größen

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

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

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

Drückt Erhaltung der Wahrsch. aus!

$$\int d\underline{r}\; \rho(\underline{r},t) = \int d\underline{r}\; \psi^*\psi = 1$$

Frage: erfüllt auch die KG-Gl. eine Kontinuitätsgleichung?

Ausgangspunkt: $\left(\Box + \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi = 0$ mit $\Box = \partial^\mu\partial_\mu = \partial_\mu\partial^\mu$

$$\partial^\mu = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\nabla\right)$$

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

$$\Rightarrow \psi^*\partial_\mu\partial^\mu\psi = -\frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\psi^*\psi \qquad (a)$$

Komplex konjugieren:

$$\partial_\mu\partial^\mu\psi^* = -\frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\psi^* \qquad \text{(komplex konjugierte KG-Gl.)}$$

multiplizieren mit ψ $\rightarrow$ (b)

betrachte (a) $-$ (b)

$$\psi^*\partial_\mu\partial^\mu\psi - \psi\partial_\mu\partial^\mu\psi^* = -\frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\left(\psi^*\psi - \psi\psi^*\right)$$

$$= 0$$

benutze: $\psi^*\partial_\mu\partial^\mu\psi = \partial_\mu\left(\psi^*\partial^\mu\psi\right) - \left(\partial_\mu\psi^*\right)\left(\partial^\mu\psi\right)$

inverse Produktregel für Ableitung

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

benutze noch: $(\partial_\mu \psi^*)(\partial^\mu \psi) = (\partial^\mu \psi^*)(\partial_\mu \psi)$

es ergibt sich

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

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

Man "erkennt": Dies entspricht bereits einer Kontinuitätsgleichung falls man folgenden Ansatz macht

$$j^\mu \sim \left(\psi^* (\partial^\mu \psi) - \psi (\partial^\mu \psi^*) \right)$$

wähle Vorfaktor für die räuml. Komponente wie im nicht-relativist. Fall

Damit: $\partial_\mu = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \nabla \right)$

j^μ

$$\underline{j} = \frac{\hbar}{2 i m_0} \left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right)$$ räuml. Komponente des Viererstroms

$$\rho = (j^0) = \frac{i\hbar}{2 m_0 c^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right)$$

zeitl. Komponente des Viererstroms

Man sieht:

$\underline{j} = \underline{j}(\underline{r}, t)$ sieht aus wie in der nicht-relativist. Quantentheorie (Schrödinger)

aber $\rho = \rho(\underline{r}, t)$ hat andere Form (Schrödinger: $\rho = \psi^* \psi$)

Insbesondere:
- ρ enthält nicht nur ψ, ψ^* sondern auch die ersten (Zeit-) Ableitungen
- Je nach Anfangsbedingungen für ψ und $\dot{\psi}$ kann nicht ausgeschlossen werden, dass ρ auch negativ werden kann!

$\Rightarrow$ Wir können also $\rho(\underline{r}, t)$ nicht einfach als Wahrsch.-dichte auffassen, so wie wir es in der nicht-relativist. Theorie gemacht haben!

e) Lösungen der KG-Gleichung für freies Teilchen

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

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

(oder allgemeiner als Überlagerung ebener Wellen)

Einsetzen

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

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

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

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

mit $E = \hbar\omega$, $\underline{p} = \hbar \underline{k}$

$$\Rightarrow E = \hbar\omega = \pm c\sqrt{\underline{p}^2 + m_0^2 c^2}$$ 2 Lösungen!

Es gibt also formal immer auch eine Lösung mit negativer Energie!!

Lösung mit positiver Energie: entspricht der Energie-Impuls-Relation, mit der wir gestartet haben!

Interpretation der Lösung mit negativer Energie .... ?

Formaler Umgang mit diesem Problem:

Quantenfeldtheorie, dort entspricht ψ nicht einfach einer Wellenfunktion sondern einen Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperator für Teilchen

Ladungsinterpretation der KG-Gleichung

Wir haben gesehen:

i) die durch die Kontinuitätsgl. definierte Dichte kann negativ werden

$\Rightarrow$ Interpretation als Aufenthaltswahrsch. nicht möglich

ii) die KG-Gl. für freies Teilchen besitzt Lösungen mit $E = \pm\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$

"Ausweg"

zu i)

Definiere durch Multiplikation mit der Elementarladung e_0 eine Ladungsdichte

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

entsprechend "Ladungsstromdichte"

$$\underline{j}'(\underline{r},t) = e_0\, \underline{j}(\underline{r},t) = -\frac{\hbar i e_0}{2m_0}\left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right)$$

Beispiel freies Teilchen

setze $\psi_\pm(\underline{r},t) = A_\pm\, e^{\overbrace{i/\hbar(\underline{p}\cdot\underline{r} \mp |E| t)}^{\pm i\underline{k}\cdot\underline{r} \mp \omega t}}$ mit $|E| = +\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$

Kombiniere mit der Def. von $\rho'(\underline{r},t)$

Man findet $\rho'_\pm(\underline{r},t) = \pm \frac{e_0 |E|}{m_0c^2} \underbrace{\psi_\pm^*(\underline{r},t)\,\psi_\pm(\underline{r},t)}_{\text{per definitionem positiv !}}$

~~Interpr~~ "Bild dazu":

ψ_+ : Teilchen mit Ladung $+e_0$
ψ_- : " " " $-e_0$

$\Big\}$ beide haben Ruhemasse m_0

man hat also "Teilchen – Antiteilchen – Paar"

Hinweis darauf, dass die relativist. QM per se Vielteilchentheorie ist

f) Nicht-relativistischer Grenzfall der KG-Gleichg für freies Teilchen

Startpunkt: KG-Gleichg
Ansatz für die Wellenfunktion:

betrachte Lösung mit positiver Energie

$$\psi(\underline{r},t) = \varphi(\underline{r},t)\, e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} \qquad \left(\sim e^{i\underline{k}\underline{r} - \frac{i}{\hbar}Et}\right)$$

$$\text{und } \varphi(\underline{r},t) = \varphi_0\, e^{i\underline{k}\cdot\underline{r} - \frac{i}{\hbar}E' t}$$

$$\text{mit } E' = E - m_0 c^2$$

Idee dahinter:
Wir spalten im Zeitfaktor $\sim e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ die Ruheenergie m_0c^2 ab, denn:

im nicht-relativist. Grenzfall ist die Ruheenergie die dominierende Energie im System, d.h.

$$E' = E - m_0c^2 \ll m_0 c^2$$

$\Rightarrow \varphi(\underline{r},t)$ ist nur langsam veränderlich mit der Zeit
$\Rightarrow$ benutze dies in der KG-Gl. $\rightarrow$ nächstes Mal!