

Wn:

relativist. freies Teilchen

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

relativist. mechanische Impuls

Vierimpuls

$$p^\mu = (\underbrace{m_0 \gamma c}_{\text{Zeit-Komponente}}, \underbrace{m_0 \gamma \underline{v}}_{\substack{\text{3 räuml. Komponenten} \\ \text{relativist. mechanische Impuls } \underline{p}}})$$

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

$$p^\mu p_\mu = m_0^2 c^2$$

nichtrelativistische Grenzfall  
 $v/c \ll 1$

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

Aus  $\textcircled{*}$  folgt die Dispersionsrelation ( $E = \hbar \omega$ ,  $\underline{p} = \hbar \underline{k}$ )

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

Frage: Neue Bewegungsgleichung für quantenmechanische Zustände?

Beantwortet jetzt Korrespondenzregeln:

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

### 1. Versuch

Nehme  $\textcircled{*}$  und setze einfach die Korrespondenzregeln ein (und wende auf Zustand  $\psi = \psi(\underline{x}, t)$  an)

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

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

### 2. Versuch

quadriere  $\textcircled{*}$  zunächst

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

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

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

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

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

Benutze noch Def. des d'Alembert-Operators

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

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

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 quantenmechanischen Teilchen)

Diskussion:

a) Die KG ist eine partielle Differentialgleichung (DGL)

Zweiter Ordnung in der Zeit

(im Unterschied zur (nicht-relativist.) Schrödinger-Gl., 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 Schrödinger-Gleichung)

$\checkmark$

Die KG-Gleichung ist "Lorentz-invariant"

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

Fernall  
Begründung:

d) Kleinert-Operator  $\square = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$

Kann geschrieben werden als Vier-Strokeprodukt!

benutzt:  $\partial^\mu = \left( \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\nabla \right)$  „Kovariant“

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

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

Interpretation:  $\square$  ist Vier-Strokeprodukt und ist damit Lorentzinvariant!

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

⇒ die KG-Gleichung ist Lorentzinvariant, falls  $\psi$  ein „Lorentz-skalar“ ist

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

$(\square \psi = 0)$

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

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

Dieser wird in den Hamiltonian eingebaut über Kopplungsterm.

$\hat{H} \rightarrow \hat{H} - \hat{\mu} \cdot \mathbf{B}$

z.B. Wasserstoffatom

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

Problem: Vektorpotential  $\underline{A}$  kann nicht als Skalarprodukt  
 von Vektorpotential geschrieben werden!

⇒ Zusatzterm der Form  $-\underline{A} \cdot \underline{B}$  würde die Gauge-Invarianz verletzen

Folgerung: Die KG-Gleichung wird benutzt für Teilchen mit Spin  $s=0$   
 (z.B. TF-Messung)

(eignet sich nicht zur Behandlung des Spins der Elektronen)

### e) Erfüllung der Kontinuitätsgleichung

Erinnerung: Klassische Elektrodynamik

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

$$\frac{\partial \rho(\underline{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{j}(\underline{r}, t) = 0 \quad \text{Drückt die Erhaltung des Gesamtbesitzes aus!}$$

(Bemerkung:  $\partial_{\mu} j^{\mu} = 0$  mit  $j^{\mu} = (\rho c, \underline{j})$  <sup>Ladungstr.</sup>)

Lorentzinvarianz!

nicht-relativist. Quantenmechanik

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

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

aus Schrödingergl. folgt:

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

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

Frage: Erfüllt auch die KG-Gleichung eine Kontinuitätsgleichung

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

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

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

analog: betrachte die komplex konjugierte KG-Gleichung:

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

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

Bilde Differenz (1) - (2)

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

Benutze unsere Kettenregel

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

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

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

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

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

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

$\curvearrowright$  nur bestimmt bis auf Vorzeichen

Wähle Variationsform nach Variation (und benutze  $\partial^\mu = (\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\nabla)$ )

Es ergibt sich:

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

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

Also:

$\vec{j}$  stellt aus uns in der nicht-relativ. QM (Schrödinger-Theorie)

aber:  $g(\vec{r}, t)$  stellt anders aus!

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

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

Dann: KG-Gleichung zweiter Ordnung in der Zeit

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

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

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

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

f) Lösen der KG-Gleichung für freie Teilchen

$$\left( \square + \left( \frac{m_0 c}{\hbar} \right)^2 \right) \psi = 0 \quad \text{mit } \psi = \psi(\vec{r}, t)$$

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  $\psi$ !

Einsetzen

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

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

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

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

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

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

positive Lösung korrespondiert 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!

### Adupinterpretation der KG-Gleichung

Wir haben gesehen:

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

Interpretations-Ausweg:

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

$$S'(r,t) = e_0 g(r,t) = \frac{i\hbar e_0}{2m_0 c^2} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right)$$

$e_0$ : Elementarladung

Beispiel freie Teilchen

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

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

Betrachte  $S'(r,t)$

$$\rightarrow S'_{\pm}(r,t) = \pm \frac{e_0 |E|}{m_0 c^2} \left( \psi_{\pm}^*(r,t) \psi_{\pm}(r,t) \right)$$