Relativistische Quantenmechanik und die Klein-Gordon Gleichung

Oliver Smith (o_smit01@wwu.de)

17. Februar 2015

Wir wollen die Klein-Gordon Gleichung untersuchen und Formalismen einführen, um Parallelen und Unterschiede zwischen dieser und der Schrödingergleichung zu zeigen. Dabei soll außerdem gezeigt werden, dass die Möglichkeit der Ladung von Teilchen eine direkte Konsequenz der relativistischen Wellengleichung ist. Zum Schluss soll noch am Beispiel des Klein Paradox gezeigt werden, welche Probleme die Klein-Gordon Gleichung jedoch mit sich bringt, die erst durch Mehrteilchentheorien gelößt werden können.

1 Nicht-relativistische Grenzwert

Da die Klein-Gordon Gleichung lediglich eine Verallgemeinerung der Schrödingergleichung für Teilchen mit relativistischen Energien darstellen soll, sollte diese für kleine Geschwindigkeiten in die Schrödingergleichung übergehen. Über die Energie-Impuls Beziehung können wir abschätzen:

$$E' := E - mc^2 \ll E$$

Da die Zeitentwicklung mit dem Faktor $\exp(-i/\hbar Et)$ von der Energie abhängt, können wir die Wellenfunktion so separieren:

$$\psi(\vec{x},t) = \varphi(\vec{x},t) exp\left(-\frac{i}{\hbar}mc^2 t\right)$$
$$\Rightarrow \left|i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right| \approx E'\varphi \ll mc^2\varphi$$

Damit ändert sich φ nur langsam mit der Zeit und wir können die zweite Ableitung von φ in der Zeit gegen Null abschätzen. Es ergibt sich für die zweite Zeitableitung der Wellenfunktion:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} &= \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \frac{i}{\hbar}mc^2\varphi\right) exp\left(-\frac{i}{\hbar}mc^2 t\right) \\ &\underset{\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}\approx 0}{\approx} \left[-\frac{i}{\hbar}mc^2\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \frac{i}{\hbar}mc^2\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \frac{m^2c^4}{\hbar^2}\varphi\right] exp\left(-\frac{i}{\hbar}mc^2 t\right) \\ &= -\left[2\frac{i}{\hbar}mc^2\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \frac{m^2c^4}{\hbar^2}\varphi\right] exp\left(-\frac{i}{\hbar}mc^2 t\right)\end{aligned}$$

Seminar *Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie*, WS 2014/15, WWU Münster

Wenn wir dies in der Klein-Gordon Gleichung

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = (\vec{\nabla}^2 - \frac{m^2c^2}{\hbar^2})\psi$$

einsetzen, erhalten wir (nachdem wir durch die e-Funktion geteilt haben):

$$\begin{aligned} -\left[\frac{2im}{\hbar}\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\varphi\right] &\approx \left(\vec{\nabla}^2 - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\varphi \\ \Leftrightarrow i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} &\approx -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\varphi \end{aligned}$$

Dies ist die wiederum die Schrödingergleichung für ein freies Teilchen.

2 Kontinuitätsgleichung

Mit der Schrödingergleichung konnten wir eine Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeiten herleiten:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = 0$$

Wobei $\rho = |\psi|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte des Teilchens und $j = \frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$ der Wahrscheinlichkeitsfluss ist. Für dir relativistische Klein-Gordon Gleichung wollen wir nun auch eine Kontinuitätsgleichung herleiten. Dazu führen wir zunächst den differentiellen Operator $\partial_\mu := (\frac{\partial}{\partial x_0}, -\vec{\nabla})$ ein. Damit können wir die Klein-Gordon Gleichung schreiben als:

$$(\hbar^2\partial_\mu\partial^\mu - m^2c^2)\psi = 0 = (\hbar^2\partial_\mu\partial^\mu - m^2c^2)\psi^*$$

Durch Multiplikation mit dem komplex konjugierten von links und Betrachten der Differenz erhalten wir:

$$\begin{aligned} 0 &= \psi^*(\hbar^2\partial_\mu\partial^\mu - m^2c^2)\psi - \psi(\hbar^2\partial_\mu\partial^\mu - m^2c^2)\psi^* \\ &= \psi\partial_\mu\partial^\mu\psi^* - \psi\partial_\mu\partial^\mu\psi^* \\ &= \partial_\mu(\psi^*\partial^\mu\psi - \psi\partial^\mu\psi^*) \end{aligned}$$

Definieren wir jetzt den Viererfluss $j_\mu = \frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla_\mu\psi - \psi\nabla_\mu\psi^*)$, reduziert sich dies zu

$$\partial_\mu j^\mu = 0.$$

Und durch Separation der Raum- und Zeitkoordinaten erhalten wir:

$$\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{\left[\frac{i\hbar}{2mc^2}(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t})\right]}_{\rho:=} + \operatorname{div}\underbrace{\left[\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*)\right]}_{\vec{j}:=} = 0$$

Und damit die Kontinuitätsgleichung für die Klein-Gordon Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = 0$$

Da wir uns nun um eine physikalische Interpretation von ρ kümmern wollen, testen wir zunächst,ob ρ eine Erhaltungsgröße ist. Dazu betrachten wir das Integral über ρ:

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho d^3x \underset{\rho\in\mathcal{C}^1}{=} \int_V \frac{\partial\rho}{\partial t}d^3x = -\int_V \nabla\vec{j}d^3x = \int_F \vec{j}dF = 0 \Rightarrow \int_V \rho d^3x = \text{const.}$$

Da bei der Betrachtung der Schrödingergleichung das ρ aus der Kontinuitätsgleichung als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden konnte, liegt nahe, dies auch hier zu versuchen. Dies führt für die Klein-Gordon Gleichung jedoch zu einem Widerspruch, da $\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2}(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t})$ auch negative Werte annehmen kann. Nun betrachten wir ρ für die Lösungen der Klein-Gordon Gleichung für freie Teilchen. Wir erinnern uns daran, dass es für jede Energie auch eine Lösung mit dem umgekehrten Vorzeichen gab, die jeweils dem Teilchen mit entgegengesetzter Ladung entsprach. Mit den Lösungen

$$\psi_\pm = A_\pm \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x} \mp |E|t)\right]$$

ergibt sich für ρ:

$$\rho_\pm == \pm\frac{|E|}{mc^2}||\psi_\pm||^2$$

Dies führt zu der Interpretation von ρ als Ladungsdichte, da $\psi_\pm$ eine Wellenfunktion für ein freies Teilchen mit Ladung $\pm$e ist.

3 Separation der Klein-Gordon Gleichung

Wir werden nun die Klein-Gordon Gleichung in zwei gekoppelte Differentialgleichungen erster Ordnung separieren, da sich herausstellen wird, dass wir dadurch einen Operator definieren können, der die Ladung eines Teilchens umkehrt. Dazu führen wir zwei Funktionen φ und χ ein, die

$$\psi = \varphi + \chi \quad \text{und} \quad i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = mc^2(\varphi - \chi)$$

erfüllen. Damit erhalten wir die zu der Klein-Gordon Gleichung äquivalenten Gleichungen:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2(\varphi+\chi) + mc^2\varphi \\ i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t} &= \frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2(\varphi+\chi) - mc^2\chi \end{aligned}$$

Dies kann leicht durch einsetzen der Relationen zwischen ψ, φ und χ auf die Klein-Gordon Gleichung zurück geführt werden. Mit Hilfe der eingeführten Funktionen und mit der Definition $\Psi = (\varphi, \chi)$ können wir die Ladungsdichte berechnen:

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{i\hbar}{2mc^2}(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}) \\ &= \frac{mc^2}{2mc^2}((\varphi^*+\chi^*)(\varphi-\chi) - (\varphi+\chi)(\varphi^*-\chi^*)) \\ &= (|\varphi|^2 - |\chi|^2) = e\Psi^\dagger\sigma_3\Psi \end{aligned}$$

Dies weist darauf hin, dass ein Vertauschen von φ und χ eine Umkehrung der Ladung bezweckt, jedoch werden wir dies später noch genauer sagen können. Jetzt können wir die gekoppelten

Differentialgleichungen mit Hilfe des Hamiltonoperators $\hat{\mathrm{H}}_f := (\sigma_3 + i\sigma_2)\frac{\hat{\mathrm{p}}^2}{2m} + mc^2\sigma_3$ (mit den Paulimatrizen σ_i) in der Schrödingerform schreiben:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{\mathrm{H}}_f\right)\Psi = 0$$

Man kann leicht berechnen, dass $\hat{\mathrm{H}}_f^2 = c^2\hat{\mathrm{p}}^2 + m^2c^4$. Multiplizieren wir nun die vorherige Gleichung mit $\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \hat{\mathrm{H}}_f\right)$ von links, so erhalten wir:

$$\begin{aligned}
&\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \hat{\mathrm{H}}_f\right)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{\mathrm{H}}_f\right)\Psi = 0 \\
\Rightarrow &\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2} + h^2c^2\vec{\nabla}^2 - m^2c^4\right)\Psi = 0 \\
\Rightarrow &\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\Psi = 0 \\
\Rightarrow &\left(\partial_\mu\partial^\mu + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\Psi = 0
\end{aligned}$$

Damit folgt, dass jede Komponente von Ψ schon die Klein-Gordon Gleichung erfüllt. Deshalb können wir beim Lösen der Klein-Gordon Gleichung für ein freien Teilchens für die Funktionen φ und χ die bekannten Lösungen wählen.

$$\Psi^\pm = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \Psi_0^\pm exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x} \mp tE)\right]$$

Mit den gekoppelten Differentialgleichungen ergibt sich weiter:

$$\mp E\varphi = \frac{\vec{p}^2}{2m}(\varphi + \chi) + mc^2\varphi, \quad \mp E\chi = -\frac{\vec{p}^2}{2m}(\varphi + \chi) - mc^2\chi$$

Durch Addition erhalten wir $\varphi = \frac{mc^2 \pm E}{mc^2 \mp E}\chi$. Deshalb setzen wir:

$$\varphi_0^\pm = mc^2 \pm E, \quad \chi_0^\pm = mc^2 \mp E$$

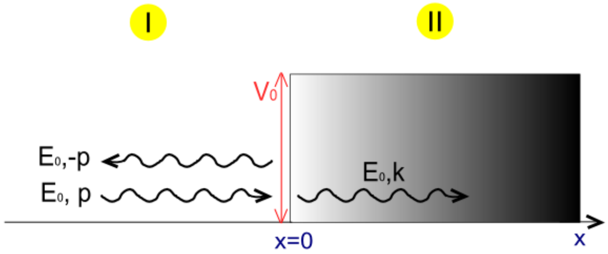
Daraus können wir ableiten, wie wir eine Wellenfunktion mit entgegengesetzter Ladung erhalten:

$$\Psi^-(p) = \begin{pmatrix} \varphi^-(p) \\ \chi^-(p) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi^{+*}(-p) \\ \varphi^{+*}(-p) \end{pmatrix} = \sigma_1\Psi^{+*}(-p)$$

4 Das Klein Paradoxon

Das Klein Paradoxon zeigt, dass die Klein-Gordon Gleichung, auch für spinlose Teilchen, keine vollständige Beschreibung einfacher Quantenmechanischer Probleme darbietet. Das betrachtete Problem, ist ein 1-dimensionales Potential $V(x) = V_0 \cdot \Theta(x)$. Dabei sollen die Amplituden der einlaufenden, reflektierten und transmittierten Welle mit I, R und T bezeichnet werden. Das heißt, wir wollen die Klein-Gordon Gleichung (mit $\hbar = c = 1$)

$$(E - V)^2\psi = -\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + m^2\psi$$



mit dem Ansatz

$$\psi = \begin{cases} \psi_L = Ie^{ipx} + Re^{-ipx}, x < 0 \\ \psi_R = Te^{ikx}, x \geq 0 \end{cases}$$

Da die Wellenfunktion stetig differenzierbar ist, folgt zunächst wie bei der Schrödingergleichung:

$$T = \frac{2p}{p+k}, \quad R = \frac{p-k}{p+k}I$$

Durch Einsetzen des Ansatzes in die Klein-Gordon Gleichung erhalten wir die Relationen für k und p:

$$p = \pm\sqrt{E^2 - m^2}, \qquad k = \pm\sqrt{(E - V_0)^2 - m^2}$$

Wir wählen die Vorzeichen von p und k beide positiv, sodass die Wellenfunktionen aus unserem Ansatz in die richtige Richtung laufen. Für die Energie gibt es jetzt drei verschiedene Möglichkeiten:

1. $E - m > V_0$:
   In dem Fall ist k reell und es gibt sowohl ein-, als auch ausfallende sowie transmittierte Welle, wie es bereits bei der Diskussion mithilfe der Schrödingergleichung für Energien oberhalb des Potentials der Fall war.

2. $E + m > V_0 > E - m$:
   Da in diesem Fall k rein imaginär ist, ergibt sich eine Totalreflexion, sodass $|I| = |R|$. Außerdem erhalten wir wiederum für $x > 0$ eine exponentiell Abfallende Lösung, ähnlich wie es im nicht relativistischen Fall für $E < V_0$ war.

3. $V_0 > E + mc^2$:
   Wie im ersten Fall ist k reell und wir erhalten propagierende Wellen vor und hinter der Barriere. Betrachten wir jedoch die Gruppengeschwindigkeit $v = \frac{\partial E}{\partial k}$ auf der rechten Seite, so erhalten wir:

   $$v = \frac{k}{E - V_0} \overset{!}{>} 0$$

   Diese muss positiv sein, da die Welle auf der rechten Seite nach rechts läuft. Da die Energie kleiner ist als das Potenzial, folgt $k < 0$. Für die Amplituden gilt:

   $$R = \frac{p-k}{p+k}I > I$$

   Damit ist die reflektierte Amplitude größer als die einfallende. Dies ist das Klein Paradox. Die Erklärung für dieses Phänomen ist, dass auf Grund des großen Potentials an dem

Übergang Teilchen-Antiteilchen Paare entstehen und sich in verschiedene Richtungen bewegen. Dies zeigt jedoch, dass die Klein-Gordon Gleichung nicht genügend ist, um große Potentiale zu beschreiben, da dafür eine Mehrteilchentheorie notwendig ist.

Quellen

Landau, Rubin H.: Quantum Mechanics II : A Second Course in Quantum Theory. New York: John Wiley & Sons, 1995.

Klasen, Michael ; Aymar, Robert: Mécanique quantique relativiste : Théories de jauge. Paris: Dunod, 2009.

Greiner, Walter: Relativistic Quantum Mechanics. Wave Equations. 3rd ed. 2000. Berlin Heidelberg: Springer Science & Business Media, 2000.