

Quantenmechanik II

Relativistische Quantenmechanik

Rückblick: Invarianzen der Schrödinger-Gleichung

Freies Teilchen:
$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta.$$

1) *Translationen*: $x' = x - a, y' = y, z' = z, t' = t.$

2) *Rotationen*: $x'_j = \sum_l a_{jl}x_l$

Drehungen sind dadurch charakterisiert, daß sie die Länge invariant lassen

$$\sum_j x_j'^2 = \sum_j \sum_{k,l} a_{jk}a_{jl}x_kx_l \stackrel{!}{=} \sum_j x_j^2.$$

Hieraus folgt dann²

$$\sum_j a_{jk}a_{jl} = \delta_{kl} \quad \text{und} \quad \sum_k a_{ik}a_{jk} = \delta_{ij},$$

Kompakt: mit $\mathbb{A} = (a_{jl})$ $\mathbb{A} \cdot \mathbb{A}^\dagger = \mathbb{A}^\dagger \cdot \mathbb{A} = \mathbb{I}.$

3) *Galilei-Transformationen*: Das gestrichene Koordinatensystem bewegt sich gleichmäßig mit der Geschwindigkeit v gegenüber dem ungestrichenen:

$$x' = x - vt, \quad y' = y, \quad z' = z, \quad t' = t,$$

Die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I.1.6})$$

transformiert sich *kovariant* unter diesen Transformationen, d.h. sie ist forminvariant beim Übergang zu den neuen Koordinaten:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \psi'(\vec{r}', t') = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta' \psi'(\vec{r}', t'). \quad (\text{I.1.7})$$

Dies wollen wir im folgenden explizit überprüfen.

zu 1) Nach Kettenregel ist

$$\frac{\partial}{\partial x'} = \frac{\partial x}{\partial x'} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}, \quad (\text{I.1.8})$$

was natürlich trivialerweise auch für die Ableitungen nach y , z und t gilt. Mit

$$\psi'(x') = \psi'(x - a) = \psi(x) \quad (\text{I.1.9})$$

ist die Kovarianz der Schrödinger-Gleichung unter Translationen offensichtlich.

zu 2) Zunächst überlegen wir uns, wie sich Ableitungen unter Rotationen transformieren. Nach Kettenregel gilt

$$\frac{\partial}{\partial x_k} = \sum_j \frac{\partial x'_j}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x'_j} = \sum_j a_{jk} \frac{\partial}{\partial x'_j}. \quad (\text{I.1.10})$$

Hiermit ergibt sich für das Transformationsverhalten des Laplace-Operators:

$$\begin{aligned} \Delta &= \sum_k \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} = \sum_k \sum_{j,l} a_{jk} a_{lk} \frac{\partial}{\partial x'_j} \frac{\partial}{\partial x'_l} \\ &= \sum_{j,l} \delta_{jl} \frac{\partial}{\partial x'_j} \frac{\partial}{\partial x'_l} = \sum_j \frac{\partial^2}{\partial x'^2_j} = \Delta'. \end{aligned} \quad (\text{I.1.11})$$

Mit $\psi'(\vec{r}', t') = \psi(\vec{r}, t)$ ist dann die Kovarianz unter Rotationen sichergestellt.

zu 3) Für die Impulse in den beiden Systemen gilt

$$p'_x = p_x - mv, \quad p'_y = p_y, \quad p'_z = p_z. \quad (\text{I.1.12})$$

Der Impulsoperator in den beiden Systemen hat die Form

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}'_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'}. \quad (\text{I.1.13})$$

Im folgenden werden wir zeigen, daß die Forminvarianz der Schrödinger-Gleichung unter Galilei-Transformationen durch die Transformation

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}mvx'} \psi'(\vec{r}', t') \quad (\text{I.1.14})$$

der Wellenfunktion gewährleistet wird. Es gilt:

$$\begin{aligned} \hat{p}_x \psi(\vec{r}, t) &= (\hat{p}'_x + mv) \psi(\vec{r}, t) = \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'} + mv \right] e^{-\frac{i}{\hbar}mvx'} \psi'(\vec{r}', t') \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}mvx'} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'} \psi'(\vec{r}', t') = e^{-\frac{i}{\hbar}mvx'} \hat{p}'_x \psi'(\vec{r}', t'). \end{aligned} \quad (\text{I.1.15})$$

Hieraus folgt analog

$$\hat{p}_x^2 \psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}mvx'} \hat{p}'_x^2 \psi'(\vec{r}', t'). \quad (\text{I.1.16})$$

Eingesetzt in die Schrödinger-Gleichung erhalten wir

$$\begin{aligned} 0 &= \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \right] \psi(\vec{r}, t) \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}mvx'} \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{1}{2m} (\hat{p}'_x^2 + \hat{p}'_y^2 + \hat{p}'_z^2) \right] \psi'(\vec{r}', t'). \end{aligned} \quad (\text{I.1.17})$$

Damit diese Gleichung erfüllt ist, muß offensichtlich

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \psi'(\vec{r}', t) = \frac{1}{2m} \left[\hat{p}_x'^2 + \hat{p}_y'^2 + \hat{p}_z'^2 \right] \psi'(\vec{r}', t') \quad (\text{I.1.18})$$

gelten. Wichtig ist nun, daß offensichtlich aus Gleichung (I.1.14)

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \left| \psi'(\vec{r}', t') \right|^2 \quad (\text{I.1.19})$$

folgt, d.h. die entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichten der ursprünglichen und transformierten Wellenfunktionen sind gleich und damit auch die von ihnen beschriebene Physik.

Wir haben also gesehen, daß die Schrödinger-Gleichung forminvariant unter den genannten Transformationen ist. Insbesondere erfüllt sie das *klassische Relativitätsprinzip*: Zwei Beobachter, die sich relativ zueinander mit der Geschwindigkeit v bewegen, sehen physikalische Ereignisse in gleicher Weise.

Wir wissen allerdings aus der Mechanik, daß Galilei-Transformationen nur für $v \ll c$ richtig sind. Für eine korrekte Formulierung des Relativitätsprinzips müssen wir berücksichtigen, daß die Lichtgeschwindigkeit c in allen Bezugssystemen gleich ist.

Wiederholung: Relativitätstheorie

Bevor wir uns mit der relativistischen Erweiterung der Quantenmechanik beschäftigen, wollen wir den dazu notwendigen Formalismus aus der Relativitätstheorie rekapitulieren. Damit läßt sich dann die Galilei-Invarianz zur *Lorentz-Invarianz* verallgemeinern.

Zunächst sei daran erinnert, daß wir statt der Galilei-Transformation *Lorentz-Transformationen*

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad y' = y, \quad z' = z, \quad ct' = \frac{ct - \frac{v}{c}x}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}. \quad (\text{I.2.1})$$

betrachten müssen. Später werden wir häufig die Abkürzungen

$$\beta := \frac{v}{c} \quad \text{und} \quad \gamma := \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad (\text{I.2.2})$$

verwenden.

Wie sich herausstellt, ist die Schrödinger-Gleichung nicht invariant unter Lorentz-Transformationen, weshalb eine relativistische Verallgemeinerung notwendig ist.

Im folgenden soll an den relativistischen Formalismus erinnert werden, den sie wahrscheinlich schon in der Mechanik- und/oder Elektrodynamik-Vorlesung kennengelernt haben. Wir setzen zunächst

$$x^0 := ct, \quad x^1 := x, \quad x^2 := y, \quad x^3 := z \quad (\text{I.2.3})$$

und definieren den (*kontravarianten*) Vierervektor³

$$x^\mu := (x^0, x^1, x^2, x^3) = (x^0, x^k) = (x^0, \vec{r}) \quad (\text{I.2.4})$$

Hierbei ist es entscheidend, daß der Index μ oben steht. Wir werden später auch einen Vektor x_μ einführen, der aber von x^μ verschieden ist. Außerdem muß man sich daran gewöhnen, daß x^μ sowohl den gesamten Viervektor als auch eine einzelne Komponente bezeichnen kann. I.a. ist jedoch aus dem Zusammenhang klar, was gemeint ist.

In diesem vierdimensionalen *Minkowski-Raum* definieren wir nun eine Metrik durch das Abstandsquadrat

$$\begin{aligned} s^2 &:= c^2 t^2 - x^2 - y^2 - z^2 = c^2 t^2 - \vec{r}^2 \\ &=: g_{\mu\nu} x^\mu x^\nu \end{aligned} \quad (\text{I.2.5})$$

mit dem *metrischen Tensor*

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.2.6})$$

Genauer muß man sagen, daß es sich um eine pseudo-euklidische Metrik handelt, da sie nicht positiv-semidefinit ist. Abstände, für die $s^2 < 0$ ist, bezeichnet man auch als *raumartig*. Ereignisse, die einen raumartigen Abstand haben, können sich nicht gegenseitig beeinflussen⁴. Ereignisse mit $s^2 > 0$ bezeichnet man als *zeitartig*. Hier ist eine gegenseitige Beeinflussung oder Kommunikation möglich. Ist $s^2 = 0$, so spricht man von einem *lichtartigen* Abstand. Hier ist eine Kommunikation nur über Signale möglich, die sich mit Lichtgeschwindigkeit ausbreiten.

Man beachte, daß wir in Gleichung (I.2.5) die sogenannte *Einsteinsche Summenkonvention* verwendet haben. Diese besagt, daß über doppelt vorkommene Indizes, von denen einer oben und einer unten steht, zu summieren ist (von 0 bis 3). Wir werden diese Konvention im folgenden immer verwenden, ohne jedesmal explizit darauf hinzuweisen.

In Analogie zur Beschreibung von Rotationen wollen wir Lorentz-Transformationen durch eine (reelle) Matrix $\Lambda^\mu{}_\nu$ charakterisieren:

$$x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu. \quad (\text{I.2.7})$$

Dabei ist zu beachten, daß der erste Index oben, der zweite unten steht!

Lorentz-Transformationen sind nun dadurch charakterisiert, daß sie den Abstand s^2 invariant lassen. Genau wie bei den Drehungen⁵ aus Kap. I.1 führt dies zu Bedingungen an die Matrix $\Lambda^\mu{}_\nu$:

$$s'^2 = g_{\mu\nu} x'^\mu x'^\nu = g_{\mu\nu} \Lambda^\mu{}_\rho x^\rho \Lambda^\nu{}_\lambda x^\lambda \stackrel{!}{=} g_{\rho\lambda} x^\rho x^\lambda = s^2, \quad (\text{I.2.8})$$

woraus folgt

$$g_{\mu\nu} \Lambda^\mu{}_\rho \Lambda^\nu{}_\lambda = g_{\rho\lambda} \quad (\text{I.2.9})$$

bzw. in Matrixdarstellung

$$\Lambda^t g \Lambda = g. \quad (\text{I.2.10})$$

Die Gesamtheit aller Lorentz-Transformationen bildet eine Gruppe⁶, die sog. *Lorentz-Gruppe*. Speziell die “Standard”-Lorentz-Transformation (I.2.1) wird durch die Matrix

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \xi & -\sinh \xi & 0 & 0 \\ -\sinh \xi & \cosh \xi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.2.11})$$

beschrieben, wobei wir die sogenannte *Rapidity* ξ eingeführt haben, die durch $\tanh \xi = \beta$ definiert ist.

Neben dem kontravarianten Ortsvektor x^μ führen wir nun einen *kovarianten Vektor* x_μ ein:

$$x_\mu := g_{\mu\nu}x^\nu = (ct, -\vec{r}) \quad (\text{I.2.12})$$

mit der Umkehrung

$$x^\mu = g^{\mu\nu}x_\nu. \quad (\text{I.2.13})$$

Durch Multiplikation mit $g^{\mu\nu}$ bzw. $g_{\mu\nu}$ können also Indizes herauf- bzw. herunter gezogen werden. Dies hat u.a. den Vorteile, daß gewisse Effekte der Metrik bereits in den Vektor eingebaut werden können, was später eine kompaktere Darstellung erlaubt. Für die bekannte euklidische Metrik ist $g_{\mu\nu} = \mathbb{1}$ und es gibt keinen Unterschied zwischen ko- und kontravarianten Vektoren.

Die Konsistenz der Gleichungen (I.2.12) und (I.2.13) wird durch

$$g_{\mu\rho}g^{\rho\nu} = \delta_\mu^\nu \quad (\text{I.2.14})$$

sichergestellt, wobei δ_μ^ν das bekannte Kronecker-Delta bezeichnet.

Für die Lorentz-Transformation Λ definieren wir analog:

$$\Lambda_\mu^\nu := g_{\mu\nu}\Lambda^\lambda_\rho g^{\rho\nu} \quad (\text{I.2.15})$$

$$=: \Lambda_{\mu\rho}g^{\rho\nu} \quad (\text{I.2.16})$$

$$=: g_{\mu\lambda}\Lambda^{\lambda\nu}. \quad (\text{I.2.17})$$

Dies gilt allgemein für Objekte mit zwei Indizes.

Die Bezeichnung “kovariant” und “kontravariant” spiegelt das unterschiedliche Transformationsverhalten der entsprechenden Vektoren unter Lorentz-Transformationen wieder

Auf Grund von Gleichung (I.2.7) wird das Transformationsverhalten des kontravarianten Vektors x^μ durch die Matrix $\Lambda^\mu{}_\nu$ beschrieben. Im Gegensatz dazu, transformiert sich der kovariante Vektor mit der Matrix $\Lambda_\mu{}^\nu$, denn:

$$\Lambda_\mu{}^\nu x_\nu = g_{\mu\lambda} \Lambda^\lambda{}_\rho g^{\rho\nu} x_\nu = g_{\mu\lambda} \Lambda^\lambda{}_\rho x^\rho = g_{\mu\lambda} x'^{\lambda} = x'_\mu, \quad (\text{I.2.18})$$

wobei wir im ersten Schritt mittels (I.2.15) die Indizes von Λ verschoben haben. Im zweiten Schritt wurde (I.2.12) ausgenutzt, um den Index des Ortsvektors zu verschieben, und schließlich (I.2.7).

Wir wissen nun, wie sich Ortsvektoren unter Lorentz-Transformationen verhalten. Ein analoges Verhalten findet man bei allen Vierervektoren. Man definiert daher:

Ein *kontravarianter Vierervektor* a^μ transformiert sich wie x^μ , d.h. gemäß Gleichung (I.2.7) mit $\Lambda^\mu{}_\nu$:

$$a'^{\mu} = \Lambda^{\mu}{}_{\nu} a^{\nu}. \quad (\text{I.2.19})$$

Ein *kovarianter Vierervektor* a_μ transformiert sich dagegen wie x_μ mit $\Lambda_\mu{}^\nu$:

$$a'_{\mu} = \Lambda_{\mu}{}^{\nu} a_{\nu}. \quad (\text{I.2.20})$$

Als nächstes wollen wir die Wirkung von Lorentz-Transformationen auf Ableitungen untersuchen. Dazu definieren wir die Ableitungsvektoren

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = \left(\frac{\partial}{\partial ct}, \vec{\nabla} \right) =: \partial_\mu \quad (\text{I.2.21})$$

und

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\frac{\partial}{\partial x}, -\frac{\partial}{\partial y}, -\frac{\partial}{\partial z} \right) = \left(\frac{\partial}{\partial ct}, -\vec{\nabla} \right) =: \partial^\mu. \quad (\text{I.2.22})$$

Wie die Bezeichnung ∂_μ und ∂^μ schon andeuten, transformieren sich die entsprechenden Vektoren kovariant bzw. kontravariant, also genau umgekehrt, wie die Ortsvektoren, nach denen abgeleitet wird.

$$\boxed{x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu.} \quad (\text{I.2.7})$$

Zum Beweis gehen wir von Gleichung (I.2.7) aus und multiplizieren diese mit⁷ $g_{\mu\lambda} \Lambda^\lambda_\rho$:

$$g_{\mu\lambda} \Lambda^\lambda_\rho x'^\mu = g_{\mu\lambda} \Lambda^\lambda_\rho \Lambda^\mu_\nu x^\nu. \quad (\text{I.2.23})$$

Hieraus folgt unter Beachtung von (I.2.9)

$$x_\rho = \Lambda^\lambda_\rho x'_\lambda. \quad (\text{I.2.24})$$

Unter der Berücksichtigung der Kettenregel ergibt sich

$$\frac{\partial}{\partial x'_\mu} = \frac{\partial x_\nu}{\partial x'_\mu} \frac{\partial}{\partial x_\nu} = \Lambda^\mu_\nu \frac{\partial}{\partial x_\nu}, \quad (\text{I.2.25})$$

womit die Kontravarianz von ∂^μ gezeigt ist. Die Kovarianz von ∂_μ folgt analog.

Aus Gleichung (I.2.24) folgt nach Multiplikation mit Λ_μ^ρ

$$x'_\mu = \Lambda_\mu^\rho x_\rho = \Lambda_\mu^\rho \Lambda^\lambda_\rho x'_\lambda \quad (\text{I.2.26})$$

und somit

$$\Lambda_\mu^\rho \Lambda^\lambda_\rho = \delta_\mu^\lambda. \quad (\text{I.2.27})$$

Dies bedeutet, daß die Transformationsmatrizen für ko- und kontravariante Viervektoren im wesentlichen invers zueinander sind. Genauer gilt in Matrixdarstellung:

$$\text{kontravariant: } x' = \Lambda x, \quad (\text{I.2.28})$$

$$\text{kovariant: } x' = (\Lambda^{-1})^t x. \quad (\text{I.2.29})$$

Es ist nützlich zu wissen, daß das Skalarprodukt

$$a_\mu b^\mu = g_{\mu\nu} a^\mu b^\mu = a^\mu b_\mu \quad (\text{I.2.30})$$

zweier Vierervektoren a_μ, b^μ invariant unter Lorentz-Transformationen ist (Aufgabe 1g). Somit ist z.B. sofort klar, daß der d'Alembert-Operator

$$\square := \partial_\mu \partial^\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2 \quad (\text{I.2.31})$$

ein invarianter Skalar unter Lorentz-Transformationen ist.

Wir betrachten nun ein elektromagnetische Feld mit Skalarpotential $\varphi(\vec{r}, t)$ und Vektorpotential $\underline{A}(\underline{r}, t)$, die zusammen einen Vierervektor

$$A^\mu := (\varphi, \underline{A}) \quad (\text{I.2.32})$$

bilden. Die Felder erhält man dann wie üblich über

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \text{rot } \vec{A}. \quad (\text{I.2.33})$$

Weiterhin müssen wir uns mit den relativistischen Eigenschaften der Grundgrößen der klassischen Mechanik befassen. Wir betrachten daher ein Teilchen mit der Ruhemasse m_0 und der Ladung e . Dieses befinde sich in einem elektromagnetischen Feld, das durch das elektromagnetische Potential (φ, \vec{A}) beschrieben wird.

Wie aus der Mechanik-Vorlesung bekannt, ist die relativistische Masse durch

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \gamma m_0 \quad (\text{I.2.34})$$

gegeben. Die mechanische Energie mc^2 und der mechanische Impuls $\vec{\Pi} = m\vec{v}$ bilden zusammen den (kontravarianten) Vierervektor

$$\Pi^\mu = (mc, \vec{\Pi}). \quad (\text{I.2.35})$$

Dessen Betrag ist wegen

$$\Pi_\mu \Pi^\mu = m^2 c^2 - \vec{\Pi}^2 = m_0^2 c^2 \quad (\text{I.2.36})$$

invariant unter Lorentz-Transformationen.

Berücksichtigt man die Kopplung an das elektromagnetische Feld, so kommt man zum kanonischen Impuls

mit
$$p^\mu = \Pi^\mu + \frac{e}{c}A^\mu = \left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right) \quad (\text{I.2.37})$$

$$E = mc^2 + e\varphi = \gamma m_0 c^2 + e\varphi, \quad \vec{p} = \vec{\Pi} + \frac{e}{c}\vec{A}. \quad (\text{I.2.38})$$

In niedrigster Ordnung liefert die Energie den bekannten nichtrelativistischen Ausdruck:

$$E = m_c^2 + \frac{m}{2}v^2 + e\varphi + O(1/c^2). \quad (\text{I.2.39})$$

Die Dynamik der klassischen relativistischen Mechanik folgt dann aus der Hamiltonfunktion

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = e\varphi(\vec{r}, \vec{p}) + \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2}. \quad (\text{I.2.40})$$

Die kanonischen Gleichungen

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}, \quad \frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}} \quad (\text{I.2.41})$$

liefern dann die erwarteten Beziehungen

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}, \quad \frac{d\vec{\Pi}}{dt} = e \left[\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right], \quad (\text{I.2.42})$$

d.h. gerade die Lorentz-Kraft.

Als nächstes:

Die Klein-Gordon-Gleichung

Klein-Gordon-Gleichung:

Wir versuchen nun, eine relativistische Grundgleichung mittels des Korrespondenzprinzips abzuleiten. Dazu werden wir die klassischen Größen Energie E und Impuls \vec{p} durch Operatoren ersetzen:

$$E \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \longrightarrow -i\hbar \vec{\nabla}, \quad (\text{I.3.1})$$

bzw. für den Vierervektor

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right) \longrightarrow i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial ct}, -\vec{\nabla} \right) = i\hbar \partial^\mu. \quad (\text{I.3.2})$$

Offensichtlich liefert eine solche Ersetzung im Energiesatz $E = H(\vec{r}, \vec{p})$ mit der klassischen nichtrelativistischen Energie $E = \frac{p^2}{2m}$ gerade die Schrödinger-Gleichung.

Als einen ersten Versuch zur Ableitung einer relativistischen Theorie nehmen wir nun die Substitution (I.3.1) im relativistischen Energiesatz (I.2.40) vor. Dies liefert die Wellengleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left[e\varphi + \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2} \right] \psi(\vec{r}, t), \quad (\text{I.3.3})$$

die im wesentlichen einer Schrödinger-Gleichung mit relativistischem Hamilton-Operator H entspricht, da nur Zeitableitungen erster Ordnung auftreten.

Die Entwicklung nach $1/c^2$ liefert die nichtrelativistische Schrödinger-Gleichung:

$$\begin{aligned}\sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2} &= m_0 c^2 \left[1 + \frac{1}{2m_0^2 c^2} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \right] + O\left(\frac{1}{c^4}\right) \\ &= m_0 c^2 + \frac{1}{2m_0} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + O\left(\frac{1}{c^4}\right).\end{aligned}\quad (\text{I.3.4})$$

Der Beitrag der Ruheenergie $m_0 c^2$ läßt sich durch die Transformation

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-i \frac{m_0 c^2}{\hbar} t} \phi(\vec{r}, t) \quad (\text{I.3.5})$$

wegtransformieren, so daß für $\phi(\vec{r}, t)$ die nichtrelativistische Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, t) = \left[\frac{1}{2m_0} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi \right] \phi(\vec{r}, t) \quad (\text{I.3.6})$$

resultiert.

Obwohl die Wellengleichung (I.3.3) relativistisch konstruiert wurde, so birgt sie doch einige Probleme:

- Formal gibt es eine Asymmetrie zwischen Raum- und Zeitableitungen. Während nur 1. Ableitungen nach t auftreten, stehen unter der Wurzel auch 2. Ableitungen nach den Ortsvariablen. Diese Asymmetrie verschleiert etwas die relativistische Invarianz, die schwer zu erkennen ist.
- Neben diesem ästhetischen Problem gibt es auch ein mathematisches. Der Quadratwurzeloperator ist nicht einfach definiert. Um damit Rechnen zu können, muß man die Wurzel entwickeln. Dabei können natürlich Probleme wie Konvergenzbereich etc. auftreten. Auch physikalisch ist dies unbefriedigend. Bei einer Entwicklung treten beliebig hohe Potenzen des Differentialoperators auf. Dies entspricht dann einer nichtlokalen Theorie, da dies - ähnlich wie einer Taylorreihe - bedeutet, daß der gesamte Verlauf der Wellenfunktion wichtig ist, und nicht nur der “in der Nähe” des betrachteten Punktes.

Ein möglicher Ausweg zur Lösung dieser Probleme besteht in der Beseitigung der Wurzel im Energiesatz durch Quadrieren:

$$(E - e\varphi)^2 = m_0^2 c^4 + c^2 \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 . \quad (\text{I.3.7})$$

Damit nimmt man aber in Kauf, daß man es nun mit zwei Lösungen zu tun hat, nämlich

$$E = e\varphi \pm \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2} . \quad (\text{I.3.8})$$

Insbesondere existiert also eine Lösung mit negativer Energie. Dies führt zu gewissen Problemen, wie wir noch sehen werden.

Das Korrespondenzprinzip angewandt auf Gleichung (I.3.7) liefert dann

$$\left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi \right)^2 - c^2 \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \right] \psi(\vec{r}, t) = m_0^2 c^4 \psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I.3.9})$$

bzw. nach Division durch $(i\hbar c)^2$

$$\left[\left(\partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu \right) \left(\partial^\mu + \frac{ie}{\hbar c} A^\mu \right) + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi(\vec{r}, t) = 0 \quad (\text{I.3.10})$$

Dies ist die *Klein-Gordon-Gleichung*, die 1926 unabhängig vom schwedischen Physiker Oskar Klein und dem Deutschen Walter Gordon gefunden wurde⁸.

Die relativistische Invarianz der Klein-Gordon-Gleichung ist in der Darstellung (I.3.10) offensichtlich, da das Skalarprodukt des Vierervektors $\partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu$ mit sich selbst ist nach Aufg. 1g invariant ist. Mit der Transformation $\psi'(\vec{r}', t') = \psi(\vec{r}, t)$ wird die relativistische Invarianz sichergestellt. Wir haben es also mit einer skalaren Wellenfunktion zu tun.

Speziell für freie Teilchen reduziert sich die Klein-Gordon-Gleichung auf

$$\left(\square + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(\vec{r}, t) = 0 \quad (\text{I.3.11})$$

mit dem in (I.2.31) definierten d'Alembert-Operator \square .

Die freie Klein-Gordon-Gleichung (I.3.11) $\left(\square + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}\right) \psi(\vec{r}, t) = 0$

entspricht einer klassischen Wellengleichung mit einem zusätzlichen Massenterm. Als Lösungen ergeben sich ebene Wellen

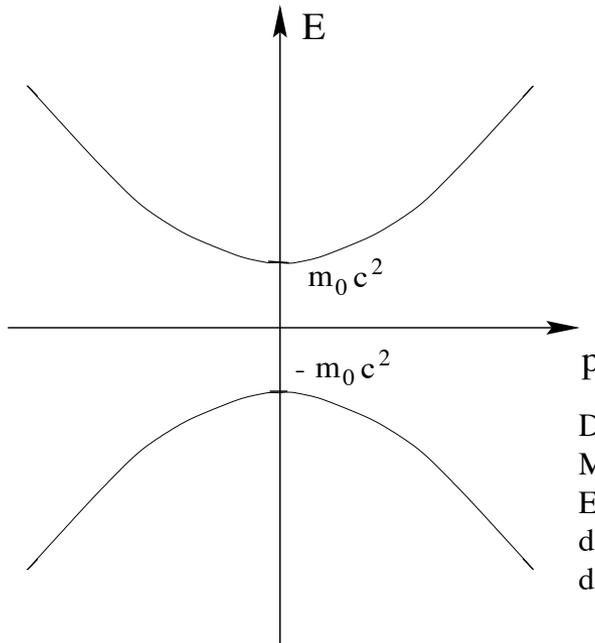
$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar} p_\mu x^\mu} = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar} (Et - \vec{p} \cdot \vec{r})} \quad (\text{I.3.12})$$

wobei der Zusammenhang zwischen Energie E und Impuls \vec{p} durch die relativistische Dispersionsbeziehung

$$\frac{E^2}{c^2} - p^2 = m_0^2 c^2 \quad (\text{I.3.13})$$

gegeben sein muß. Wie erwartet gibt es daher Lösungen mit positiver und negativer Energie

$$E = \pm c \sqrt{m_0^2 c^2 + p^2}. \quad (\text{I.3.14})$$



Spektrum der freien Klein-Gordon-Gleichung

Dies ist in Abb. I.3.1 dargestellt. Wie man sieht, gibt es eine Lücke auf Grund der endlichen Masse m_0 . Zustände mit Energien zwischen $-m_0 c^2$ und $m_0 c^2$ existieren nicht.

Ein nach unten unbeschränktes Spektrum führt aber zu Stabilitätsproblemen, da im Grundzustand die Energie minimal⁹ sein sollte. Eine mögliche Lösung, die wir im nächsten Kapitel genauer diskutieren werden, ist die Interpretation der Zustände mit $E < 0$ als *Antiteilchen*.

Kontinuitätsgleichung und Interpretation der Wellenfunktion

Wie bei der Schrödinger-Gleichung stellt sich auch hier die Frage nach der Interpretation der Wellenfunktion. Im Falle der Schrödinger-Gleichung konnte eine Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0 \quad (\text{I.3.15})$$

hergeleitet werden, die eine Interpretation von

$$\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (\text{I.3.16})$$

als Wahrscheinlichkeitsdichte nahelegt. Die zugehörige Wahrscheinlichkeitsstromdichte ist bekanntlich durch

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \quad (\text{I.3.17})$$

gegeben.

In einer relativistischen Theorie erwartet man eine ähnliche Kontinuitätsgleichung, die sich in kovarianter Form schreiben läßt als

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \quad (\text{I.3.18})$$

mit dem Strom-Viervektor

$$j^\mu = (c\rho, \vec{j}). \quad (\text{I.3.19})$$

Wir wollen nun für die Klein-Gordon-Gleichung eine solche Beziehung ableiten und gehen dabei vor wie im Falle der Schrödinger-Gleichung. Dazu multiplizieren wir die (freie) Klein-Gordon-Gleichung von links mit ψ^* und ihr konjugiert-komplexes¹⁰ von links mit ψ und subtrahieren die Gleichungen voneinander:

$$\begin{aligned} 0 &= \psi^* \left(\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar} \right) \psi - \psi \left(\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar} \right) \psi^* \\ &= \partial_\mu (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*). \end{aligned} \quad (\text{I.3.20})$$

Der Ausdruck in der Klammer ist im wesentlichen die gesuchte Stromdichte j^μ . Aus Dimensionsgründen fügen wir noch einen Faktor $\frac{i\hbar}{2m_0}$ ein:

$$j^\mu = \frac{i\hbar}{2m_0} (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*). \quad (\text{I.3.21})$$

Damit gilt dann die Kontinuitätsgleichung (I.3.18). Der eingeführte Faktor stellt dabei sicher, daß 1) die 0.-te Komponente die Dimension (1/Volumen) einer Wahrscheinlichkeitsdichte hat und 2) der nichtrelativistische Grenzfall korrekt wiedergegeben wird.

Explizit haben wir für den Stromanteil \vec{j} in $j^\mu = (c\rho, \vec{j})$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im_0} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*), \quad (\text{I.3.22})$$

also den gleichen Ausdruck (I.3.17) wie in der nichtrelativistischen Quantenmechanik. Für den Dichteanteil ρ ergibt sich aber

$$\rho = \frac{i\hbar}{2m_0 c^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right). \quad (\text{I.3.23})$$

$$\rho = \frac{i\hbar}{2m_0c^2} \left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial t} \right).$$

Diese Größe ist im Gegensatz zum nichtrelativistischen Ausdruck $\rho = |\psi|^2$ nicht positiv-definit und kann daher nicht als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden. Der Grund liegt in der Tatsache, daß die Klein-Gordon-Gleichung von 2. Ordnung in der Zeit ist. Somit können als Randbedingung ψ und $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ an einem Punkt so vorgegeben werden, daß der Ausdruck dort negativ ist.

Wir betrachten noch den nichtrelativistischen Grenzfall. Mit Hilfe der Transformation (I.3.5) kann man einsehen¹¹, daß in diesem Fall

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} \approx -i \frac{m_0c^2}{\hbar} \psi \quad (\text{I.3.24})$$

gilt. Hieraus ergibt sich dann der bekannte nichtrelativistische Ausdruck

$$\rho \approx |\psi|^2 \quad (\text{I.3.25})$$

für die Wahrscheinlichkeitsdichte.

Probleme der Klein-Gordon-Gleichung

Zusammenfassend halten wir fest, daß es die Klein-Gordon-Gleichung mit einigen Problemen behaftet ist:

- a) Es existieren Lösungen mit negativer Energie, wobei das Spektrum freier Teilchen sogar nach unten unbeschränkt ist.
- b) Eine positiv-definite Wahrscheinlichkeitsdefinition im üblichen Sinne ist nicht möglich.
- c) Da die Wellenfunktion ψ nur von den Koordinaten \vec{r}, t abhängt, gibt es keine Möglichkeit, innere Freiheitsgrade (z.B. den Spin) einzubauen.

Die Probleme a) und b) sind im Prinzip lösbar, wie wir gleich sehen werden. Später werden wir noch ausführlich darlegen, daß sich die Lösungen mit negativer Energie als *Antiteilchen* interpretieren lassen. Problem b) werden wir gleich genauer diskutieren.

Das Problem c) macht die Suche nach einer anderen relativistischen Gleichung notwendig, mit der sich auch Elektronen (mit ihrem Spin $1/2$) beschreiben lassen. c) war der Hauptgrund, warum man lange Zeit nicht an die physikalische Relevanz der Klein-Gordon-Gleichung geglaubt hat, denn 1926 waren eigentlich nur Teilchen mit Spin $1/2$ bekannt (Elektronen, Protonen, Neutronen). Später hat sich dann aber gezeigt, daß sich mit der Klein-Gordon-Gleichung im Prinzip spinlose ($S = 0$) Skalarteilchen beschreiben lassen. Ein prominentes Beispiel sind die sogenannten π -Mesonen, die 1947 entdeckt wurden. Daß die Klein-Gordon-Gleichung Teilchen mit Spin 0 beschreibt sieht man z.B. daran, daß sie im nichtrelativistischen Grenzfall in die (spinlose) Schrödinger-Gleichung übergeht. Außerdem kann man dies auch aus dem Transformationsverhalten der Wellenfunktion unter Lorentz-Transformationen ersehen.

Wir kommen nun zu Problem b) zurück. Es stellt sich die Frage, ob ρ und \vec{j} vielleicht anders interpretiert werden können? Dies ist tatsächlich so. Dazu gehen wir über zur *Ladungsdichte*

$$j'^{\mu} = ej^{\mu} = (c\rho', \vec{j}') = \frac{ie\hbar}{2m_0} (\psi^* \partial^{\mu} \psi - \psi \partial^{\mu} \psi^*), \quad (\text{I.3.26})$$

wobei e die Elementarladung ist. ρ' ist nun eine Ladungsdichte und kann deshalb positive und negative Werte annehmen. \vec{j}' ist die zugehörige Ladungsstromdichte. Wir werden noch sehen, daß dies in natürlicher Weise mit der Interpretation der $E < 0$ -Zustände als Antiteilchen zusammenpasst.

Um ein besseres Gefühl für die oben angegebene Interpretation zu bekommen, betrachten wir nun speziell ein freies Teilchen. Der Ansatz

$$\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)} \quad (\text{I.3.27})$$

liefert nach Einsetzen in die (freie) Klein-Gordon-Gleichung die Bedingung

$$E^2 = c^2 (p^2 + m_0^2 c^2) \quad (\text{I.3.28})$$

und somit die beiden Lösungen

$$\psi_{\pm} = A_{\pm} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} \mp E_p t)} \quad (\text{I.3.29})$$

mit der Energie

$$E_p = c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}. \quad (\text{I.3.30})$$

Hieraus ergibt sich für die Ladungsdichte (I.3.26)

$$\rho'_{\pm} = \pm \frac{eE_p}{m_0c^2} |\psi_{\pm}|^2. \quad (\text{I.3.31})$$

Dies legt folgende Interpretation der Wellenfunktionen ψ_{\pm} nahe: ψ_+ beschreibt ein Teilchen mit der Ladung $+e$ und ψ_- eines mit derselben Masse m_0 , aber der Ladung $-e$.

Um zu einer normierbaren Wellenfunktion zu gelangen, sperren wir das Teilchen in einen Kasten der Kantenlänge L ein. Auf Grund der periodischen Randbedingungen ergibt sich

$$\psi_{\pm}^{(n)} = A_{\pm}^{(n)} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_n \cdot \vec{r} \mp E_n t)} \quad (\text{I.3.32})$$

mit dem Impuls

$$\vec{p}_n = \frac{2\pi}{L} \vec{n} \quad \text{mit} \quad \vec{n} = (n_x, n_y, n_z) \in \mathbb{N}^3 \quad (\text{I.3.33})$$

und der zugehörigen Energie $E_n := E_{p_n}$.

Auf Grund der Normierungsbedingung

$$\pm e = \int_{L^3} d^3r \rho'_{\pm}(\vec{r}) = \pm \frac{eE_n}{m_0c^2} |A_{\pm}^{(n)}|^2 L^3 \quad (\text{I.3.34})$$

ergibt sich die normierte Wellenfunktion

$$\psi_{\pm}^{(n)} = \sqrt{\frac{m_0c^2}{E_n L^3}} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_n \cdot \vec{r} \mp E_n t)}. \quad (\text{I.3.35})$$

Man beachte, daß der Normierungsfaktor für beide Lösungen gleich ist, ein Unterschied besteht lediglich im Zeitfaktor $\exp(\pm \frac{i}{\hbar} E_n t)$. Somit hat die allgemeine Lösung für positive bzw. negative freie Spin-0-Teilchen die Form

$$\psi_+ = \sum_n A_n \psi_+^{(n)} = \sum_n A_n \sqrt{\frac{m_0 c^2}{E_n L^3}} e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p}_n \cdot \vec{r} - E_n t)}, \quad (\text{I.3.36})$$

$$\psi_- = \sum_n B_n \psi_-^{(n)} = \sum_n B_n \sqrt{\frac{m_0 c^2}{E_n L^3}} e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p}_n \cdot \vec{r} + E_n t)}. \quad (\text{I.3.37})$$

Als nächstes drängt sich die Frage auf, ob auch neutrale Teilchen beschrieben werden können. Aus

$$\rho' = \frac{ie\hbar}{2m_0 c^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{e\hbar}{m_0 c^2} \text{Im} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \quad (\text{I.3.38})$$

lesen wir ab, daß in diesem Falle ψ reell sein muß. Somit ergibt sich als allgemeine Wellenfunktion für ein neutrales Teilchen

$$\begin{aligned} \psi_0^{(n)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_+^{(n)}(\vec{p}_n) + \psi_-^{(n)}(-\vec{p}_n) \right] \\ &= \sqrt{\frac{m_0 c^2}{E_n L^3}} 2 \cos \left(\frac{\vec{p}_n \cdot \vec{r} - E_n t}{\hbar} \right). \end{aligned} \quad (\text{I.3.39})$$

Man beachte dabei, daß $\psi_-^{(n)}$ mit dem entgegengesetzten Impuls $-\vec{p}_n$ eingeht.

Man beachte dabei, daß $\psi_-^{(n)}$ mit dem entgegengesetzten Impuls $-\vec{p}_n$ eingeht. Damit ist $(\psi_0^{(n)})^* = \psi_0^{(n)}$ gewährleistet und somit verschwindet die zugehörige Ladungsdichte $\rho' = 0$ wegen (I.3.38). Allerdings verschwindet auch die zugehörige Stromdichte $\vec{j}' = 0$, d.h. die Kontinuitätsgleichung wird zu einer trivialen Identität.

Zusammenfassend können wir also feststellen, daß es für die relativistische freie Bewegung eines spinlosen Teilchens zu jedem Impuls \vec{p} drei Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung gibt, die mit den elektrischen Ladungen $(+, -, 0)$ korrespondieren. Außerdem zeigt sich (siehe Gleichung (I.3.38)), daß die Wellenfunktionen ψ und ψ^* entgegengesetzte Ladungen beschreiben.

Schrödinger-Form der Klein-Gordon-Gleichung

Wie jede Differentialgleichung 2. Ordnung kann auch die Klein-Gordon-Gleichung in ein System aus zwei gekoppelten DGL 1. Ordnung (in der Zeit) umgewandelt werden. Dies wird uns später Fortschritte bei der Interpretation ermöglichen.

Zur Umwandlung machen wir den Ansatz

$$\psi = \phi + \chi \quad \text{und} \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = m_0 c^2 (\phi - \chi) \quad (\text{I.3.40})$$

was äquivalent ist zu

$$\phi = \psi + \frac{i\hbar}{2m_0 c^2} \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad \chi = \psi - \frac{i\hbar}{2m_0 c^2} \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (\text{I.3.41})$$

Mit diesen Definitionen ist nun die freie Klein-Gordon-Gleichung

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \left(\Delta - \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi \quad (\text{I.3.42})$$

äquivalent zu den gekoppelten Differentialgleichungen

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta (\phi + \chi) + m_0 c^2 \phi, \quad (\text{I.3.43})$$

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = +\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta (\phi + \chi) - m_0 c^2 \chi, \quad (\text{I.3.44})$$

Dies sieht man folgendermaßen ein: Die Summe der Gleichungen (I.3.43) und (I.3.44) liefert gerade die zweite Gleichung der Definition (I.3.40). Bildet man die Differenz

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\phi - \chi) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta(\phi + \chi) + m_0 c^2(\phi + \chi) \quad (\text{I.3.45})$$

so folgt unter Benutzung von (I.3.40) durch Differentiation nach t

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{i\hbar}{m_0 c^2} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \psi + m_0 c^2 \psi \quad (\text{I.3.46})$$

und hieraus die Klein-Gordon-Gleichung (I.3.42).

Zu einer kompakteren Darstellung gelangen wir durch Einführung des Vektors

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (\text{I.3.47})$$

Die Klein-Gordon-Gleichung in der Form (I.3.43), (I.3.44) läßt sich dann schreiben als

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H_f \Psi \quad (\text{I.3.48})$$

mit dem Hamiltonoperator H_f (für freie Teilchen)

$$H_f = (\tau_3 + i\tau_2) \frac{p^2}{2m_0} + \tau_3 m_0 c^2 \quad (\text{I.3.49})$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \frac{p^2}{2m_0} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} m_0 c^2. \quad (\text{I.3.50})$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H_f \Psi \quad (\text{I.3.48})$$

$$H_f = (\tau_3 + i\tau_2) \frac{p^2}{2m_0} + \tau_3 m_0 c^2 \quad (\text{I.3.49})$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \frac{p^2}{2m_0} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} m_0 c^2. \quad (\text{I.3.50})$$

Gleichung (I.3.48) hat die gleiche Struktur wie die Schrödinger-Gleichung. Insbesondere ist sie nur von 1. Ordnung in der Zeit t . Die τ_j sind die Pauli-Matrizen

genügt.
$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.3.51})$$

Sie haben hier nichts mit dem Spin zu tun¹². Ihr Auftreten liegt im wesentlichen darin begründet, daß sie gemeinsam mit der Einheitsmatrix eine Basis der 2×2 -Matrizen bilden.

Man kann noch explizit zeigen, daß jede Komponente von Ψ einer Klein-Gordon-Gleichung

Wir wollen nun Ladungs- und Stromdichte durch Ψ ausdrücken. Für die Ladungsdichte ergibt sich:

$$\begin{aligned} \rho' &= \frac{ie\hbar}{2m_0c^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \\ &= \frac{ie\hbar}{2m_0c^2} \left((\phi^* + \chi^*) \frac{m_0c^2}{i\hbar} (\phi - \chi) + (\phi + \chi) \frac{m_0c^2}{i\hbar} (\phi^* - \chi^*) \right) \\ &= e (|\phi|^2 - |\chi|^2) \\ &= e \Psi^+ \tau_3 \Psi. \end{aligned} \quad (\text{I.3.52})$$

Dabei ist $\Psi^+ = (\phi^*, \chi^*)$. Im zweiten Schritt haben wir Gleichung (I.3.40) ausgenutzt, um die Zeitableitung von ψ durch ϕ und χ auszudrücken.

Durch eine analoge Rechnung ergibt sich für die Stromdichte

$$\vec{j} = \frac{e\hbar}{2im_0} \left[\Psi^\dagger \tau_3 (\tau_3 + i\tau_2) \vec{\nabla} \Psi - \vec{\nabla} \Psi^\dagger \tau_3 (\tau_3 + i\tau_2) \Psi \right]. \quad (\text{I.3.53})$$

Wir betrachten nun noch einmal die Lösung für freie Teilchen. Dabei geben wir nur die wesentlichen Ergebnisse an. Details der Rechnungen sind Gegenstand der Übungen. Mit dem Ansatz

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)} \quad (\text{I.3.54})$$

ergibt sich durch Einsetzen in die Klein-Gordon-Gleichung

$$E = \pm \sqrt{p^2 + m_0^2 c^2} = \pm E_p, \quad (\text{I.3.55})$$

wie erwartet. Wir betrachten nun die beiden Fälle positiver und negativer Energie.

Für $E = +E_p$ erhalten wir die Wellenfunktion

$$\Psi^{(+)} = A_+ \begin{pmatrix} \phi_0^{(+)} \\ \chi_0^{(+)} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - E_p t)} =: \begin{pmatrix} \phi^{(+)}(\vec{p}) \\ \chi^{(+)}(\vec{p}) \end{pmatrix} \quad (\text{I.3.56})$$

mit

$$\begin{pmatrix} \phi_0^{(+)} \\ \chi_0^{(+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_0 c^2 + E_p \\ m_0 c^2 - E_p \end{pmatrix}. \quad (\text{I.3.57})$$

Für die Lösung mit negativer Energie $E = -E_p$ ergibt sich

$$\Psi^{(-)} = A_- \begin{pmatrix} \phi_0^{(-)} \\ \chi_0^{(-)} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} + E_p t)} =: \begin{pmatrix} \phi^{(-)}(\vec{p}) \\ \chi^{(-)}(\vec{p}) \end{pmatrix} \quad (\text{I.3.58})$$

mit

$$\begin{pmatrix} \phi_0^{(-)} \\ \chi_0^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_0 c^2 - E_p \\ m_0 c^2 + E_p \end{pmatrix}. \quad (\text{I.3.59})$$

Für ein Teilchen in einem Kasten der Kantenlänge L ergibt sich für die Normierungskonstanten

$$A_+ = A_- = \frac{1}{\sqrt{4m_0 c^2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{L^3 E_p}}. \quad (\text{I.3.60})$$

Besonders interessant ist nun der nichtrelativistische Grenzfall. Hier erhält man (s. Übungen)

$$A_+ \begin{pmatrix} \phi_0^{(+)} \\ \chi_0^{(+)} \end{pmatrix} \approx \frac{1}{\sqrt{L^3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{I.3.61})$$

$$A_- \begin{pmatrix} \phi_0^{(-)} \\ \chi_0^{(-)} \end{pmatrix} \approx \frac{1}{\sqrt{L^3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.3.62})$$

Mit Blick auf unsere frühere Diskussion der Lösungen der freien Klein-Gordon-Gleichung (siehe z.B. Gleichung (I.3.31)) bedeutet dies, daß für Zustände positiver Ladung¹³ im nichtrelativistischen Fall die obere Komponente groß wird, für Zustände negativer Ladung aber die untere Komponente.

Dies wollen wir etwas genauer verstehen. Durch Vergleich der entsprechenden Ausdrücke sieht man, daß

$$\Psi^{(-)}(-\vec{p}) = \begin{pmatrix} \phi^{(-)}(-\vec{p}) \\ \chi^{(-)}(-\vec{p}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi^{(+)}(\vec{p}) \\ \phi^{(+)}(\vec{p}) \end{pmatrix} = \tau_1 (\Psi^{(+)}(\vec{p}))^* . \quad (\text{I.3.63})$$

Dies kann man – z.B. unter Berücksichtigung des Verhaltens im nichtrelativistischen Grenzfall – folgendermaßen interpretieren: Gehört der Zustand $\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}$ zu einer positiven Ladung, dann beschreibt

$$C\Psi := \Psi_c =: \tau_1 \Psi^* = \begin{pmatrix} \chi^* \\ \phi^* \end{pmatrix} \quad (\text{I.3.64})$$

ein Teilchen mit negativer Ladung (und umgekehrt).

Ψ_c heißt *ladungskonjugierter Zustand von Ψ* , die durch den Operator C beschriebene Transformation *Ladungskonjugation*.

Offensichtlich gilt:

$$(\Psi_c)_c = \tau_1 (\tau_1 \Psi^*)^* = \tau_1^2 (\Psi^*)^* = \Psi, \quad (\text{I.3.65})$$

wobei wir neben den bekannten Rechenregeln ausgenutzt haben, daß für die Pauli-Matrizen $\tau_j^2 = \mathbb{1}$ gilt.

Im einzelnen gilt unter Ladungskonjugation

$$\phi_0^{(+)} \rightarrow \chi_0^{(-)}, \quad (\text{I.3.66})$$

$$\chi_0^{(+)} \rightarrow \phi_0^{(-)}, \quad (\text{I.3.67})$$

$$\vec{p} \rightarrow -\vec{p}, \quad (\text{I.3.68})$$

$$E_p \rightarrow -E_p. \quad (\text{I.3.69})$$

Später werden wir noch zu untersuchen haben, wie sich andere Größen (z.B. Drehimpulse wie der Spin) verhalten.

Bezeichnet man (willkürlich) die durch Ψ beschriebenen Partikel als Teilchen, dann heißen die durch Ψ_c beschriebenen Partikel *Antiteilchen*. Ein Beispiel sind die bereits erwähnten π -Mesonen. Hier bezeichnet man üblicherweise das negativ geladene π^- als Teilchen und das π^+ -Meson als Antiteilchen.

Für neutrale Teilchen muß der ladungskonjugierte Zustand wieder der Zustand selbst sein: Neutrale Teilchen sind ihre eigenen Antiteilchen. Es muß also gelten:

$$\Psi_c = \tau_1 \Psi^* \stackrel{!}{=} \alpha \Psi, \quad (\text{I.3.70})$$

d.h. der ladungskonjugierte Zustand ist proportional zum ursprünglichen Zustand. Die Proportionalitätskonstante α muß dabei reell, da wir bereits früher gesehen haben, daß für neutrale Teilchen $\psi = \phi + \chi$ reell ist. Somit ist $\text{Im}\phi = -\text{Im}\chi$. Da Ψ_c auch ein neutrales Teilchen beschreibt, ist außerdem $\text{Im}(\alpha\phi) = -\text{Im}(\alpha\chi)$ und deshalb α reell. Weiterhin folgt

$$\Psi \stackrel{!}{=} (\Psi_c)_c = \tau_1(\alpha\Psi)^* = \alpha\tau_1\Psi^* = \alpha^2\Psi. \quad (\text{I.3.71})$$

Also folgt $\alpha^2 = 1$ und somit

$$\alpha = \pm 1. \quad (\text{I.3.72})$$

Es gibt also zwei Arten von neutralen Teilchen, nämlich solche mit

- a) positiver Ladungsparität ($\alpha = +1$). Für diese ist $\Psi_c = \Psi$ (und deshalb $\phi^* = \chi$).
- b) negativer Ladungsparität ($\alpha = -1$). Für solche Teilchen¹⁴ ist $\Psi_c = -\Psi$ (und deshalb $\phi^* = -\chi$).