§1 Klein–Gordon Gleichung

a) Die Klein–Gordon Gleichung und die relativistische Mechanik

Die Differentialgleichung vom Typ einer Wellengleichung

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\,\Phi \;=\; \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]\Phi - \left(\frac{\omega_0}{c}\right)^2 \Phi \tag{1}$$

ist die Klein–Gordon Gleichung. Auch Schrödinger hat diese Gleichung vorgeschlagen† und viele Veröffentlichungen von anderen Autoren, übrigens alle im Jahre 1926, gibt es hierzu.* In dieser Gleichung ist c die Lichtgeschwindigkeit und $\Phi(\vec{r},\,t)$ analog zur nichtrelativistischen Schrödingergleichung die komplexe Wellenfunktion. Die Frage ist, ob $\Phi^*\,\Phi$ auch als Wahrscheinlichkeit aufgefaßt werden kann, ein Teilchen zur Zeit t an der Stelle $\vec{r} = (x,\,y,\,z\,)$ zu finden. Dabei ist Φ^* komplex konjugierte zu Φ. Bei einer wirklichen Wellengleichung wie z.B. für eine elektromagnetische Welle im Vakuum würde der letzte Term auf der rechten Seite von (1) fehlen. Hier ist er wichtig, um Teilchen mit Masse beschreiben zu können.

Durch die Dispersionbeziehung $\omega(k)$ ist Gl.(1) mit der Mechanik von Teilchen verknüpft. Mit $\Phi = \exp\bigl(i\,(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{r})\bigr)$ als Ansatz für eine Lösung erhält man zunächst

$$\omega^2 = (c\,k)^2 + \omega_0^2 \quad \text{und} \quad k = |\vec{k}|\ , \tag{2a}$$

wobei ω die Kreisfrequenz und $\vec{k}$ der Wellenzahlvektor ist. Er gibt die Wellenlänge und die Ausbreitungsrichtung der ebenen Welle an. Diese Relation mit $\hbar^2$ multipliziert ist mit $E = \hbar\,\omega$ und $p = \hbar\,k$

$$E^2 = (c\,p)^2 + (m_0\,c^2)^2 \tag{2b}$$

Damit dies zu einer relativistischen Energie–Impuls Beziehung wird, muß $\hbar\,\omega_0 = m_0\,c^2$ sein. Für eine relativistische Partikelmechanik ist die Quadratwurzel von (2*b*) die Hamiltonfunktion $\mathcal{H}$

$$\mathcal{H} = \sqrt{c^2\,\vec{p}^{\,2} + m_0^2\,c^4} + e\,V(\vec{r})\ . \tag{3}$$

Dabei ist ein elektrisches Potential $e\,V$ hinzugefügt, daß in der Wellengleichung (1) noch fehlt. Man braucht eigentlich auch ein Magnetfeld. Durch die Ersetzung $\vec{p} \to \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$ könnte es ebenfalls berücksichtigt werden. Allgemein gilt, dass ein elektrostatische Potential den Energienullpunkt verschiebt und ein Vektorpotential die Impulskoordinaten.**

Bei der Quadratwurzel in (3) ist das positive Vorzeichen gemeint. Für kleine Impulse $\vec{p}$ ist $\sqrt{c^2\,\vec{p}^{\,2} + m^2\,c^4} \approx m_0\,c^2 + \vec{p}^{\,2}/(2\,m_0)$, so daß die Hamiltonfunktion bis auf $m_0\,c^2$ die *klassische* Form hat, die als Dispersionbeziehung $\hbar\omega = \hbar^2\,\vec{k}^{\,2}/(2\,m_0)$ interpretiert mit der nichtrelativistischen Schrödingergleichung folgt. Das Wurzelziehen bei der partiellen Differentialgleichung (1) ist aber keine *gute Idee*, wie man sich denken kann, während für die Hamiltonfunktion (3) es keinerlei Schwierigkeiten gibt.

---

† siehe hierzu “Relativistic Wave Equations” in L.I. Schiff, Quantum Mechanics, Mc Graw Hill.

* siehe hierzu S.S. Schweber, An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory, Row, Peterson & C.,1961

** Sowohl $e\,V$ als auch $e\,\vec{A}$ sind Energien. Da $c\,p$ ebenfalls eine Energie ist, hat $e\,A/c$ die Dimension eines Impulses.

Benutzt man die HAMILTONschen Gleichungen, um die Geschwindigkeit

$$\dot{x} \;=\; \partial\mathcal{H}/\partial p_x \;=\; c^2\,p_x\Big/\sqrt{c^2\,\vec{p}^{\,2} + m_0^2\,c^4} \tag{4}$$

zu bestimmen, wobei analoge Gleichungen für die anderen Komponenten $\dot{y}$ und $\dot{z}$ der Geschwindigkeiten $\vec{v}$ gelten, dann ist

$$1 \,-\, \vec{v}^{\,2}/c^2 = m_0^2\,c^4/(c^2\,\vec{p}^{\,2} + m_0^2\,c^4) \quad\rightarrow\quad E \;=\; m_0\,c^2\Big/\sqrt{1 \,-\, \vec{v}^{\,2}/c^2}\;\;. \tag{5}$$

Die von der Geschwindigkeit abhängige Masse $E/c^2 = m = m_0\Big/\sqrt{1 \,-\, \vec{v}^{\,2}/c^2}$ bestimmt nach Gl.(4) auch den Impuls $p_x = v_x\,m$ so daß

$$\dot{p}_x \;=-\partial\mathcal{H}/\partial p_x = -\partial V/\partial x \tag{6}$$

gilt. Soweit die relativistische Punktmechanik!

Die mehr den quantenmechanischen Überlegungen entsprechende Form der KLEIN–GORDON Gleichung (1) ist also

$$-\hbar^2\partial_t^2\,\Phi \;=\; \big[-(\hbar\,c)^2\,\nabla^{\,,2} \;+\; (m_0c^2)^2\,\big]\,\Phi\;. \tag{7}$$

Ausganspunkt ist also die relativistische Energieimpulsbeziehung (2b), die sich mit den Substitutionen $E \;\rightarrow\; i\,\hbar\,\partial_t$ und $\vec{p} \;\rightarrow\; -i\,\hbar\,\nabla$ in Differentialoperatoren verwandelt, die dann auf die Wellenfunktion Φ wirken. Mit elektromagnetischen Potentialen V und $\vec{A}$ ist der Ausganspunkt $(E - e\,V)^2 = c^2\,(\vec{p} - (e/c)\vec{A})^2 + (m_0\,c^2)^2$.

b) Ladungs– und Stromdichten

Für die SCHRÖDINGERgleichung ist die Teilchendichte ρ und der Teilchenstrom $\vec{j}$ durch

$$\rho = \varphi^*\,\varphi \qquad \vec{j} = \frac{\hbar}{2\,i\,m}\,[\,\varphi^*\nabla\varphi - (\nabla\varphi^*)\,\varphi\,] \tag{8}$$

definiert, so daß die Kontinuitätsgleichung

$$\partial\rho/\partial t \;+\; \mathrm{div}\,\vec{j} = 0 \tag{9}$$

gilt. Dies läßt sich direkt nachprüfen, indem man die Ableitung von ρ nach der Zeit in der Kontinuittsgleichung mit Hilfe der SCHRÖDINGERgleichung $i\hbar\,\partial\varphi/\partial t = -\hbar^2/(2\,m)\,\varphi + V\varphi$ in Ortsableitungen umwandelt.

Für die KLEIN–GORDON Gleichung gelingt dies nur, wenn die Dichte ρ anders definiert wird:

$$\rho = \frac{i\,\hbar}{2\,m\,c^2}\,\big[\,\Phi^*(\partial\Phi/\partial t) - (\partial\Phi^*/\partial t)\,\Phi\,\big] \tag{10}$$

Die Analogie zur Stromdichte $\vec{j}$ in (8) ist leicht zu erkennen. In einer relativistischen Beschreibung werden ja Ortskoordinaten $\vec{r}$ und die Zeit oder $c\,t$ formell gleichbehandelt und zu einem Vierervektor zusammengefaßt. Die Kontinuitätsgleichung (9) kann man als Divergenz $\mathrm{Div}\,\vec{J} \;=\; \partial\rho/\partial t + \mathrm{div}j$ auffassen, die somit invariant gegenüber Lorentztransformationen ist.

Differenziert man ρ der Gleichung (10) nach der Zeit t, so erhält man zweite Ableitungen der Wellenfunktion $\partial^2\Phi/\partial t^2$ und $\partial^2\Phi^*/\partial t^2$. Ersetzt man diese Ableitungen durch die rechte Seite der Gl.(1), dann sollte sich mit (9) $-\mathrm{div}\,\vec{j}$ ergeben, was auch der Fall ist mit dem in (8) definierten $\vec{j}$. Allerdings muß man dort φ durch Φ ersetzen.

Die Größe ρ der Gl.(10) ist nicht notwendigerweise positiv und kann deshalb nicht als eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit für ein Teilchen interpretiert werden. Man kann jedoch zeigen, daß im nichtrelativistischen Grenzfall sich das ρ von (8) ergibt. Betrachtet man $e\,\rho$, so liegt eine Interpretation als Ladungsdichte nahe, denn die negative Energiewerte mit $\Phi \propto \exp(+i\,mc^2\,t/\hbar)$ ergeben ein umgekehrtes Vorzeichen für die Ladung e.

Mit dieser einfachen Rezeptur kann man jedoch dieses Problem nicht loswerden. Das Integral über die Ladungsdichte ρ

$$\iiint \rho\,dx\,dy\,dz \tag{11}$$

ist zeitunabhängig und könnte damit eine Norm für Φ definieren. Wegen des Vorzeichenproblems hat man jedoch eine indefinite Norm, die also auch negativ oder sogar Null sein kann. In dem eingangs zitierten Buch von Schweber findet man hierzu folgende Bemerkung:

... Because of the possibility of negative ρ values, the Klein–Gordon equation fell into disrepute for about seven years after it was first proposed in 1926. It was only in 1934 that Pauli and Weiskopf [Helv. Phys. Acta, 7, 709 (1934)] re-established the validity of the equation by reinterpreting it as a field equation in the same sense as Maxwell's equation of the electromagnetic field and quantizing it.

b) Relativistisches Wasserstoffproblem

Die Lösung des relativistischen Wasserstoffproblems ist im Buch von Leonard Schiff zu finden. Es ist dort zu sehen, daß es nicht schwierig ist, die Lösungsmethode von der normalen Schrödinger-gleichung auf die relativistische, d.h. die Klein–Gordon Gleichung, zu übertragen ist. Nach dem Separationsansatz hat die vom Radius r abhängige Wellenfunktion R der Klein–Gordon Gleichung mit einem elektrostatischen Potential $e\,V = -Z\,e^2/r$ eines Kernes der Ladung Z die Form

$$\left\{-\frac{1}{r}\,\frac{d^2}{d\,r^2}\,r + \frac{l(l+1)}{r^2}\right\} R = \frac{(E - e\,V)^2 - (m\,c^2)^2}{\hbar^2\,c^2}\,R \tag{12}$$

Der wesentliche Punkt ist, daß das Potential V auf der rechten Seite auch quadratisch eingeht und damit den Drehimpulsterm $l(l+1)/r^2$ modifiziert. Bringt man also den V^2–Term von der rechten auf die linke Seite, dann ergibt sich

$$\left\{-\frac{1}{r}\,\frac{d^2}{d\,r^2}\,r + \frac{l(l+1) - (Z\,\alpha)^2}{r^2}\right\} R = \left\{\frac{E^2 - (m\,c^2)^2}{\hbar^2\,c^2} + \frac{2E\,Ze^2}{\hbar^2\,c^2\,r}\right\} R\,. \tag{12$'$}$$

Die Konstante α nennt man die Feinstrukturkonstante, weil die hohe Entartung n^2 mit $n = n_r + l + 1$ durch die Änderung des Drehimpulspotential $l(l+1)/r^2 \to [l(l+1) - \alpha^2]/r^2$ in (12$'$) augehoben wird. Ist die Kernladungszahl Z klein, dann ist wie beim Wasserstoff mit $Z = 1$ die Änderung des Spektrums nur als *Feinstruktur* sichtbar. Es ist $\alpha = e^2/(\hbar\,c) \approx 1/137,036$.

Zum Vergleich die nichtrelativistischen Gleichung

$$\left\{-\frac{1}{r}\frac{d^2}{d r^2}\, r + \frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\tilde R = \left\{\frac{2\,m\,\tilde E}{\hbar^2} + \frac{2\,m\,Ze^2}{\hbar^2\, r}\right\}\tilde R\,. \tag{13}$$

Die negative Energie $\tilde E$ ist hier nur die Bindungsenergie des Elektrons und enthält nicht zusätzlich die Ruhenergie $m\,c^2$ wie $E = m\,c^2 + \tilde E$ in (12) und in (12′). Da $\tilde E$ klein gegenüber $m\,c^2$ ist, unterscheiden sich die Bohrschen Radien der relativistischen und der nichtrelativistischen Gleichungen nicht sehr. Der zweite Term in Gl.(12′) und Gl.(13) muß der Dimension nach sich wie $1/\text{Länge}^2$ verhalten, d.h., $1/a = E\,e^2/(\hbar^2\,c^2) \approx m\,e^2/\hbar^2 = 1/a_{Bohr}$. Mit $\tilde\rho = r/(Z\,a_{Bohr})$ vereinfacht sich (13) zu

$$\left\{-\frac{1}{\tilde\rho}\frac{d^2}{d\,\tilde\rho^{\,2}}\,\rho + \frac{l(l+1)}{\tilde\rho^{\,2}}\right\}\tilde R = \left\{\frac{\tilde E}{\tilde E_g} + \frac{2}{\tilde\rho}\right\}\tilde R\,, \tag{13′}$$

wobei $\tilde E_g = (Z\,e)^2/(2\,a_{Bohr})$ die Grundzustandsenergie ist. Die anderen Energiewerte sind mit der Hauptquantenzahl $n = n_r + l + 1$

$$\frac{\tilde E_n}{E_g} = -\frac{1}{(n_r + l + 1)^2} \tag{14}$$

Die radiale Quantenzahl $n_r = 0,\,1,\,2\,\ldots$ wie auch die zum Drehimpuls $l = 0,\,1,\,2\,\ldots$ gehörende Quantenzahl kann nur ganze Zahlen einschließlich der Null annehmen, wobei $n_r \le l$ die Anzahl der Knoten oder Nulldurchgänge der radialen Wellenfunktion ist.

Für die Klein–Gordon Gleichung (12′) ersetzt man analog $\rho = r/(Z\,a)$ mit $1/a = E\,e^2/(\hbar^2\,c^2)$ und erhält

$$\left\{-\frac{1}{\rho}\frac{d^2}{d\,\rho^2}\,\rho + \frac{l(l+1) - (Z\,\alpha)^2}{\rho^2}\right\} R = \left\{\frac{E^2 - (m\,c^2)^2}{E^2\,(Z\,\alpha)^2} + \frac{2}{\rho}\right\} R\,. \tag{12″}$$

Der erste Term auf der rechten Seite hat eine etwas merkwürdige Form und enthält die dimensionslose Feinstrukturkonstante $\alpha = e^2/(\hbar\,c)$. Wie vorher bei (14) führt die Lösung der Differentialgleichung (12″) auf die folgende “Quantisierung” der Energie

$$\frac{E^2 - (m\,c^2)^2}{E^2\,(Z\,\alpha)^2} = -\frac{1}{(n_r + l' + 1)^2}\,, \tag{15}$$

nur ist l' keine ganze Zahl mehr, sondern eine effektive Drehimpulsquantenzahl, die etwas von ganzzahligen Werten abweicht. Es muß $l'(l'+1) = l(l+1) - (Z\,\alpha)^2$ gelten. Nach der Energie aufgelöst ergibt diese Gleichung mit $(l' + \frac{1}{2})^2 = (l + \frac{1}{2})^2 - (Z\,\alpha)^2$

$$E = m\,c^2\left[1 + \frac{(Z\,\alpha)^2}{\left[n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \left(Z\,\alpha\right)^2}\,\right]^2}\right]^{-1/2} \tag{16}$$

Allerdings ist dies nicht die beobachte Feinstruktur, die bei dieser Rechnung herauskommt, weil der Elektronenspin fehlt. Merkwürdigerweise hat Sommerfeld mit Hilfe der Quantisierung der klassisch berechneten Wirkung, d.h., auch ohne Spin, die richtige Feinstruktur berechnen können[†].

[†] Für Details siehe: A. Sommerfeld, *Atombau und Spektrallinien*, Band I & II, Vieweg & Sohn, Braunschweig 1939.