Eine Verallgemeinerung der Schrödingerschen Wellenmechanik in relativistische Gültigkeitsbereiche

ERWIN KASPER

Institut für Angewandte Physik der Universität Tübingen, 74 Tübingen, Auf der Morgenstelle

(Z. Naturforsch. **28a**, 216–221 [1973]; eingeg. 16. November 1972)

A Generalisation of Schrödinger's Wave Mechanics for Relativistic Regions of Validity

A scalar wave equation is derived which can be applied to the relativistic motion of charged particles in slowly varying electromagnetic fields and which is valid in a sufficiently small energy interval, if spin effects can be neglected. Since this wave equation is a linear partial differential equation of first order in the time derivative but of second order in the space derivatives, it is not relativistically invariant. But it is possible to define a positively definite particle density from which a conservation law can be derived. The main success of this theory is a very simple generalisation of the Schrödinger theory of classical wave mechanics in such a way that it can be also applied to relativistic particles.

1. Einleitung

Es gibt Aufgabenbereiche in der Physik, in denen man die Bewegung relativistischer Elektronen wellenmechanisch zu berechnen hat, wo aber der Elektronenspin praktisch keine Rolle spielt. Als Beispiel sei hier nur die Berechnung der Beugung von Elektronen hoher Energien in elektronenoptischen Abbildungsgeräten genannt. In solchen Fällen erscheint es zum Zweck der Vereinfachung der Rechnungen wünschenswert, statt der streng gültigen Dirac-Gleichung eine einfache skalare Wellengleichung zu verwenden.

Das Ziel dieser Arbeit ist die Aufstellung einer solchen Wellengleichung. Diese soll im Gegensatz zur Klein-Gordon-Gleichung nur die Zeitableitung erster Ordnung enthalten, was unter erfüllbaren Voraussetzungen näherungsweise möglich ist. Die Wellengleichung stellt damit eine natürliche Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung der nichtrelativistischen Einteilchentheorie in relativistische Bereiche dar.

Eine Wellengleichung, welche nur die Zeitableitung erster Ordnung, aber höhere Ableitungen nach den Ortskoordinaten enthält, kann in dieser Form nicht relativistisch invariant sein. Bei Problemen, bei denen es ein in natürlicher Weise ausgezeichnetes Bezugssystem gibt, wie das Laborsystem in dem oben genannten Beispiel, spielt dieser Mangel aber praktisch keine Rolle, ebensowenig wie er in der gesamten nichtrelativistischen Quantenmechanik stört.

Auch wird die Reduktion auf eine Wellengleichung von erster Ordnung in der Zeitableitung eine Einschränkung des Gültigkeitsbereiches auf ein schmales Energieintervall erforderlich machen, was aber bei vielen Beugungs- und Streuproblemen nicht sehr störend ist, so daß noch ein interessanter Anwendungsbereich der nachfolgend dargestellten Theorie vorhanden ist.

2. Aufstellung der relativistischen Wellengleichung

Die Bewegung eines Elektrons im elektromagnetischen Feld, dargestellt durch dessen Potentiale $V(\boldsymbol{r},t)$, $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$, wird im Rahmen der relativistischen Wellenmechanik bekanntlich durch die Dirac-Gleichung

$$\boldsymbol{D}\,\Psi(\boldsymbol{r},t) = [c\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \beta m_0 c^2 - e\,V(\boldsymbol{r},t) - i\hbar\,(\partial/\partial t)]\,\Psi(\boldsymbol{r},t) = 0 \tag{1}$$

beschrieben. Darin ist

$$\boldsymbol{p} = -i\hbar\,\nabla + e\,\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) \tag{2}$$

der Operator des Teilchenimpulses. Offensichtlich gilt mit (1) auch die iterierte Dirac-Gleichung

$$\boldsymbol{D}^2\,\Psi(\boldsymbol{r},t) = 0\,. \tag{3}$$

Die Ausführung dieser Iteration unter Beachtung der Vertauschungsrelationen der Diracschen Operatoren $\boldsymbol{\alpha}$, β führt in bekannter Weise auf:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{p}^2\,\Psi + (m_0 c)^2\,\Psi - (1/c^2)\,(e\,V + i\hbar\,(\partial/\partial t))^2\,\Psi \\ = -\,e\hbar\,\boldsymbol{B}\,\boldsymbol{\sigma}\,\Psi + (ie\hbar/c)\,\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{\alpha}\,\Psi\,,\end{aligned} \tag{4}$$

wobei $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$ und $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)$ die Feldstärken des elektromagnetischen Feldes sind.

Bei hohen Teilchenenergien E werden die Spin-Wechselwirkungsterme auf der rechten Seite von (4) vernachlässigbar klein, es gilt:

$$e\hbar c^2\,|\boldsymbol{B}| \ll E^2, \qquad e\hbar c\,|\boldsymbol{E}| \ll E^2\,. \tag{5}$$

Interessiert man sich nicht für diese sehr kleinen Zusatzglieder, so kann man sie in guter Näherung vernachlässigen und erhält so die Klein-Gordon-Gleichung

$$\boldsymbol{p}^2\,\Psi + (m_0 c)^2\,\Psi = (1/c^2)\,(e\,V + i\hbar\,(\partial/\partial t))^2\,\Psi\,. \tag{6}$$

Da alle vier Komponenten des Dirac-Spinors Ψ nun dieselbe Wellengleichung erfüllen, reicht eine skalare Wellenfunktion Ψ, zu der diese Komponenten proportional sind, für die Beschreibung der Wellenausbreitung aus. Das bedingt natürlich, daß der Diracsche Ausdruck für die Teilchenstromdichte nicht mehr anwendbar ist und statt dessen eine andere Formel hierfür gefunden werden muß.

Die Klein-Gordon-Gleichung (6) hat bekanntlich den wesentlichen Nachteil, daß sie die Zeitableitung zweiter Ordnung von Ψ enthält. Diese läßt sich jedoch unter plausiblen und oft erfüllten Bedingungen eliminieren. Gl. (6) würde eine harmonische Zeitabhängigkeit von Ψ gestatten, wenn die Potentiale V und A zeitunabhängig wären. Die Wellengleichung

$$\begin{aligned}(-i\hbar\,\nabla + e\,\boldsymbol{A}_0(\boldsymbol{r}))^2\,\Psi_0(\boldsymbol{r},t) + (m_0 c)^2\,\Psi_0(\boldsymbol{r},t)\\ = (1/c^2)\,(e\,V_0(\boldsymbol{r}) + i\hbar\,(\partial/\partial t))^2\,\Psi_0(\boldsymbol{r},t)\end{aligned} \tag{7}$$

besitzt eine Lösung in der Form

$$\Psi_0(\boldsymbol{r},t) = \chi(\boldsymbol{r})\exp\{-\,i E_0 t/\hbar\}\,, \tag{8}$$

wobei E_0 ein Eigenwert der zugehörigen stationären Wellengleichung ist. Gilt nun beispielsweise

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{A}_0(\boldsymbol{r}) + \boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r},t),\quad V(\boldsymbol{r},t) = V_0(\boldsymbol{r}) + V'(\boldsymbol{r},t)\,, \tag{9}$$

wobei $\boldsymbol{A}'$ und V' kleine Störpotentiale sind, gilt ferner

$$|\dot{\boldsymbol{A}}'| \ll (E_0/\hbar)\,|\boldsymbol{A}'|\,,\qquad |\dot{V}'| \ll (E_0/\hbar)\,|V'|\,, \tag{10}$$

so ist für die Lösung der Wellengleichung (6), in welche (9) als Potentiale einzusetzen sind, folgender Ansatz möglich und sinnvoll:

$$\Psi(\boldsymbol{r},t) = \psi(\boldsymbol{r},t)\exp\{-\,i E_0 t/\hbar\}\,. \tag{11}$$

Die Funktion $\psi(\boldsymbol{r},t)$ kann sich von $\chi(\boldsymbol{r})$ nur um ein kleines Störglied unterscheiden. Insbesondere muß sie zeitlich sehr langsam veränderlich sein:

$$|\dot{\psi}(\boldsymbol{r},t)| \ll (E_0/\hbar)\,|\psi(\boldsymbol{r},t)|\,. \tag{12}$$

Im folgenden wird von (7) bis (10) nicht explizite Gebrauch gemacht werden. Diese Beziehungen sollen nur verdeutlichen, daß der Ansatz (11), (12) möglich ist. Die weiteren Überlegungen bauen allein auf (11) und (12) auf. Im folgenden wird $E_0 = m_0 c^2 + e\,U$ gesetzt. Bei der Behandlung von Streuproblemen, die hier hauptsächlich in Betracht kommen, ist dann $e\,U$ definiert als Erwartungswert der kinetischen Energie im asymptotischen Raumbereich, in welchem die Potentiale $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$, $V(\boldsymbol{r},t)$ verschwinden sollen. Bei der Behandlung gebundener Zustände, die ebenfalls möglich ist, muß man von (7) bis (10) explizite Gebrauch machen, und E_0 ist dann als Eigenwert definiert.

Setzt man (11) in (6) ein, so kann man wegen (12) das Glied mit $\ddot{\psi}$ als ein von zweiter Ordnung kleines Glied vernachlässigen. Mit der Einführung einer veränderlichen, aber stets positiven Masse gemäß

$$\begin{aligned} m(\boldsymbol{r},t) &= (1/c^2)\,(E_0 + e\,V(\boldsymbol{r},t))\\ &= m_0 + (e/c^2)\,(U + V(\boldsymbol{r},t))\end{aligned} \tag{13}$$

erhält man nach einiger elementarer Rechnung

$$\boldsymbol{p}^2\,\psi = p^2(\boldsymbol{r},t)\,\psi + 2 i\hbar\,\sqrt{m}\,(\partial/\partial t)\left(\sqrt{m}\,\psi\right). \tag{14}$$

Darin ist die Funktion $p^2(\boldsymbol{r},t)$ definiert durch

$$\begin{aligned} p^2(\boldsymbol{r},t) &= c^2\,(m^2(\boldsymbol{r},t) - m_0^2)\\ &= 2 m_0\,e\,(U+V)\,(1 + (e(U+V)/2 m_0 c^2)).\end{aligned} \tag{15}$$

Im Falle verschwindender Energieunschärfe und zeitunabhängiger Potentiale hat $p^2(\boldsymbol{r},t)$ die anschauliche Bedeutung des klassischen Impulsquadrats des Teilchens. Im Falle gebundener Zustände wird $m < m_0$, also $p^2 < 0$, was aber keineswegs die Gültigkeit der hier durchgeführten Überlegungen beeinträchtigt.

Die Wellengleichung (14) hat bereits die in der Einleitung beschriebene Form einer linearen partiellen Differentialgleichung von erster Ordnung in der Zeitableitung und von höherer Ordnung in den Ableitungen nach den Ortskoordinaten und ist als solche nicht relativistisch invariant. Sie gilt in einem ausgezeichneten Bezugssystem, welches in der Regel das Laborsystem ist. Darüber hinaus ist sie invariant in Bezug auf Galilei-Transformationen.

Die Einschränkung (12) bedeutet, daß die Unschärfe ΔE der Energie klein gegen die Energiekonstante E_0 sein soll, daß sich (14) also nur auf solche Wechselwirkungsprozesse anwenden läßt, die sich in einem hinreichend kleinen Energieintervall um den Mittelwert E_0 abspielen.

3. Vergleich mit der Schrödinger-Gleichung

Die hier vorgeschlagene Wellengleichung (14) und die daraus später durch Transformation gewonnene Normalform (22) sind insofern mit der zeitabhängigen Schrödingergleichung vergleichbar, als alle diese Wellengleichungen von erster Ordnung in der Zeitableitung sind. Diese Reduktion der Ordnung der Wellengleichung wird erkauft durch Einschränkung des Gültigkeitsbereichs auf ein genügend kleines Energieintervall. Dieses enthält bei der Schrödingergleichung die Ruheenergie $m_0 c^2$, während hier der Mittelwert $E_0 = m_0 c^2 + e\,U$ ist. Da die Konstante U keinen Einschränkungen unterliegt, hat man hier einen größeren Anwendungsbereich der Theorie zur Verfügung.

Ein bedeutender Unterschied liegt darin, daß im Gültigkeitsbereich der Schrödingergleichung die potentielle Energie dem Betrage nach klein gegen die Ruheenergie sein muß, $|e\,V| \ll m_0 c^2$. Von dieser Einschränkung ist die vorliegende Theorie frei, da (10) eine wesentlich schwächere Forderung darstellt. In den folgenden Abschnitten wird dargelegt werden, wie sich der Formalismus der Schrödingerschen Wellenmechanik durch Berücksichtigung der Abhängigkeit der Teilchenmasse vom Potential $-eV$ verallgemeinern läßt. Dies könnte beispielsweise bei der Behandlung von Streuprozessen an Hüllelektronen auf den innersten Schalen von Atomen mit großer Ordnungszahl von Interesse sein.

Ist diese Abhängigkeit der Masse vom Potential schwach, d. h. stellt das räumlich und zeitlich veränderliche Potential $V(\boldsymbol{r},t)$ eine kleine Störung dar, für welche $|eV| \ll E_0$ gilt, so ist die einfachste Verallgemeinerung der Schrödingergleichung die als Sonderfall aus (14) folgende Wellengleichung

$$\boldsymbol{p}^2\psi = p_\infty^2\psi + 2m_\infty\,(eV\psi + i\hbar\,(\partial\psi/\partial t))\,, \tag{16}$$

in welcher p_∞^2 bzw. m_∞ die asymptotischen Werte der Funktionen $p^2(\boldsymbol{r},t)$ bzw. $m(\boldsymbol{r},t)$ sind, d.h. die Werte für $V(\boldsymbol{r},t)\to 0$. Gleichung (16) unterscheidet sich von der Schrödingergleichung formal nur in den Konstanten p_∞^2 und m_∞. Sie ist beispielsweise brauchbar für die Behandlung von Streuprozessen in erster Bornscher Näherung. Die im folgenden behandelte Theorie ist dagegen wesentlich allgemeiner.

4. Die Kontinuitätsgleichung

Aus (14) läßt sich eine Kontinuitätsgleichung für die Teilchenzahl ableiten. Erweitert man (14) mit ψ^* und die zu (14) konjugiert komplexe Gleichung mit ψ, subtrahiert dann die so entstehenden Gleichungen, so erhält man bis auf einen beliebigen, konstanten und positiven Faktor C:

$$(\partial/\partial t)\,\varrho(\boldsymbol{r},t) + \operatorname{div}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) = 0 \tag{17}$$

mit der Teilchendichte

$$\varrho(\boldsymbol{r},t) = C\,m(\boldsymbol{r},t)\,|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 \tag{18}$$

und der Teilchenstromdichte

$$\begin{aligned}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) &= (\hbar C/2i)\,(\psi^*\operatorname{grad}\psi - \psi\operatorname{grad}\psi^*)\\ &\quad + (e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\,\varrho(\boldsymbol{r},t)/m(\boldsymbol{r},t))\,.\end{aligned} \tag{19}$$

Aus (17) folgt der Erhaltungssatz $\int \varrho(\boldsymbol{r},t)\,\mathrm{d}^3r = \text{const.}$ Es ist möglich, dieses Integral auf 1 zu normieren, so daß $\varrho(\boldsymbol{r},t)$ eine gewöhnliche positiv definite Teilchendichte darstellt. Dazu muß gelten:

$$\int m(\boldsymbol{r},t)\,|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\,\mathrm{d}^3r = M\,, \qquad C = (1/M)\,. \tag{20}$$

Die Größe M hat die Bedeutung einer konstanten gemittelten Masse, die jedoch keine unmittelbare physikalische Bedeutung hat. Man kann nämlich (17) nicht als Kontinuitätsgleichung der Energie deuten, weil die Teilchenenergie bei einer expliziten Zeitabhängigkeit der elektromagnetischen Potentiale im allgemeinen nicht erhalten bleibt.

5. Die Normalform der Wellengleichung

Der Faktor $m(\boldsymbol{r},t)$ in der Teilchendichte (18) bzw. $\sqrt{m(\boldsymbol{r},t)}$ in der Wellengleichung (14), der sich in mancher Hinsicht störend bemerkbar machen könnte, läßt sich durch eine einfache Transformation beseitigen:

$$\Phi(\boldsymbol{r},t) = \sqrt{(m(\boldsymbol{r},t)/M)}\,\psi(\boldsymbol{r},t)\,. \tag{21}$$

Man erhält dann die Wellengleichung in ihrer Normalform:

$$\boldsymbol{H}\,\Phi(\boldsymbol{r},t) = i\hbar\,(\partial/\partial t)\,\Phi(\boldsymbol{r},t)\,. \tag{22}$$

Für den Operator $\boldsymbol{H}$ wird folgender Ansatz gemacht:

$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{p}\cdot F(\boldsymbol{r},t)\,\boldsymbol{p} - G(\boldsymbol{r},t)\,. \tag{23}$$

Geht man mit (21), (22) und (23) an die Umformung von (14) heran, so erhält man nach einigen elementaren Rechnungen das Resultat:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{H} = \boldsymbol{p}\cdot(1/2m(\boldsymbol{r},t))\,\boldsymbol{p} &- \left(\hbar^2/2\sqrt{m(\boldsymbol{r},t)}\right)\Delta\left(1/\sqrt{m(\boldsymbol{r},t)}\right)\\ &- (p^2(\boldsymbol{r},t)/2m(\boldsymbol{r},t))\,,\end{aligned} \tag{24}$$

wobei der Δ-Operator im zweiten Glied nur auf den Faktor $m^{-1/2}$ wirkt, nicht auf die Wellenfunktion, auf die $\boldsymbol{H}$ anzuwenden ist. Ersichtlich ist dieser Hamilton-Operator hermitisch.

Das zweite Glied in $\boldsymbol{H}$ läßt sich im Fall der Teilchenbewegung in elektrostatischen Feldern umformen zu:

$$\begin{aligned}&-\left(\hbar^2/2\sqrt{m(\boldsymbol{r})}\right)\Delta\left(1/\sqrt{m(\boldsymbol{r})}\right)\\ &\qquad = -\,(3e^2\hbar^2\,|\boldsymbol{E}|^2/8m^3c^4)\,.\end{aligned} \tag{25}$$

Es ist in den allermeisten Fällen bedeutungslos; man kann es ebensogut vernachlässigen, wie in (4) die Spin-Glieder vernachlässigt wurden. Hingegen wird das im ersten Term von (24) implizit enthaltene in $\boldsymbol{E}$ lineare Glied berücksichtigt.

Die Ausdrücke für die Teilchendichte und die Teilchenstromdichte lauten nun:

$$\varrho(\boldsymbol{r},t) = |\Phi(\boldsymbol{r},t)|^2, \tag{26}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) &= (\hbar/2im(\boldsymbol{r},t))\,(\Phi^*\operatorname{grad}\Phi - \Phi\operatorname{grad}\Phi^*)\\ &\quad + (e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\,\varrho(\boldsymbol{r},t)/m(\boldsymbol{r},t))\,.\end{aligned} \tag{27}$$

Das Bestehen der Kontinuitätsgleichung (17) mit den Ausdrücken (26) und (27) für die Teilchendichte und die Teilchenstromdichte läßt sich auch direkt aus der Wellengleichung (22) ohne den Umweg über (14) beweisen.

6. Erwartungswerte von Observablen

Der einfache Ausdruck (26) für die Teilchendichte legt es nahe, den Erwartungswert einer beliebigen Observablen A, welche durch einen hermitischen Operator $\boldsymbol{A}$ dargestellt wird, in bekannter Weise durch den

Ausdruck

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \int \Phi^* \boldsymbol{A}\, \Phi \,\mathrm{d}\tau = : (\Phi, \boldsymbol{A}\, \Phi) \\ &\equiv (1/2)\,(\Phi, \boldsymbol{A}\, \Phi) + (1/2)\,(\boldsymbol{A}\, \Phi, \Phi)\end{aligned} \tag{28}$$

darzustellen. Dann gilt in üblicher Weise für die Zeitableitung von $\langle A\rangle$:

$$\begin{aligned}(\mathrm{d}/\mathrm{d}t)\,\langle A\rangle &= (\Phi, (\mathrm{d}\boldsymbol{A}/\mathrm{d}t)\,\Phi), \\ (\mathrm{d}\boldsymbol{A}/\mathrm{d}t) &= (\partial \boldsymbol{A}/\partial t) + (i/\hbar)\,[\boldsymbol{H}, \boldsymbol{A}]\,.\end{aligned} \tag{29}$$

Speziell gilt für den Geschwindigkeitsoperator

$$\boldsymbol{v} = (\mathrm{d}\boldsymbol{r}/\mathrm{d}t) = \boldsymbol{p}\,(1/2m) + (1/2m)\,\boldsymbol{p} \equiv \left(1/\sqrt{m}\right) \boldsymbol{p} \left(1/\sqrt{m}\right). \tag{30}$$

Für jede Observable F, deren Operator in der Ortsdarstellung eine Funktion $F(\boldsymbol{r}, t)$ ist, gilt:

$$(\mathrm{d}F/\mathrm{d}t) = (\partial F/\partial t) + (1/2)\,(\boldsymbol{v} \cdot \operatorname{grad} F + \operatorname{grad} F \cdot \boldsymbol{v})\,, \tag{31}$$

wobei das erste Glied rechts die explizite Zeitabhängigkeit darstellt und das zweite die konvektive.

Wenn man die Masse $m(\boldsymbol{r}, t)$ als eine räumlich und zeitlich sehr langsam veränderliche Funktion ansehen darf, was bedeutet, daß

$$|\operatorname{grad} m| \ll (|\boldsymbol{p}|/\hbar)\, m, \qquad |\dot{m}| \ll (1/\hbar)\, |p|^2 \tag{32}$$

gilt, dann folgt unter Vernachlässigung von Gliedern mit zweiten Ableitungen von m für die Zeitableitungen von Impuls und Energie:

$$(\mathrm{d}\boldsymbol{p}/\mathrm{d}t) = -\, e\, \boldsymbol{E} - (e/2)\,(\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} - \boldsymbol{B} \times \boldsymbol{v}), \tag{33}$$

$$(\mathrm{d}/\mathrm{d}t)\,(\boldsymbol{H} + e\, V) = -\,(e/2)\,(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{E} + \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{v})\,. \tag{34}$$

Der Erwartungswert $\langle E\rangle$ des Hamilton-Operators $\boldsymbol{H}$ ist genau dann eine Konstante, wenn die elektromagnetischen Potentiale nicht explizite von der Zeit abhängen. Dieser Erwartungswert hat dann die Bedeutung der Differenz zwischen der gesamten Teilchenenergie und der Energiekonstanten $E_0 = m_0\, c^2 + e\, U$. Aus dem Bestehen der Voraussetzung (12) folgt, daß $|\langle E\rangle| \ll E_0$ gelten muß, dieser Erwartungswert also nur eine kleine Störung sein kann.

7. Lagrange- und Hamilton-Dichte des Feldes

Es ist möglich, die Normalform (22) der Wellengleichung mit dem Hamilton-Operator (24) aus einem Variationsprinzip abzuleiten. Dieses lautet in bekannter Weise $\delta \int L\, \mathrm{d}^3 r = 0$, wobei hier speziell für die zugehörige Lagrange-Dichte

$$\begin{aligned}L = &-\,(1/2m(\boldsymbol{r}, t))\, |\boldsymbol{p}\, \Phi|^2 + G\,(\boldsymbol{r}, t)\, |\Phi|^2 \\ &- \hbar\, Im\, (\Phi^*\, (\partial \Phi/\partial t))\end{aligned} \tag{35}$$

gilt. Dabei ist $G\,(\boldsymbol{r}, t)$ bis auf das Vorzeichen durch die letzten beiden Glieder von (24) definiert. Die Aufstellung der Eulerschen Differentialgleichungen zu (35), bei der die Funktionen Φ und Φ^* als unabhängige Feldvariable behandelt werden, ergibt gerade (22) sowie die dazu konjugiert komplexe Wellengleichung. Die zugehörige elementare Rechnung soll hier nicht wiedergegeben werden.

Die aus der Lagrange-Dichte (35) gemäß

$$H = \dot{\Phi}\,(\partial L/\partial \dot{\Phi}) + \dot{\Phi}^*\,(\partial L/\partial \dot{\Phi}^*) - L \tag{36}$$

sich ergebende Hamilton-Dichte H errechnet sich zu

$$H = (1/2m)\, |\boldsymbol{p}\, \Phi|^2 - G\,(\boldsymbol{r}, t)\, |\Phi|^2\,. \tag{37}$$

Vernachlässigt man das durch (25) gegebene Glied, so läßt sich (37) wegen (13) und (16) umformen zu:

$$\begin{aligned}&H + e\,(U + V)\, |\Phi|^2 \\ &\quad = (1/2m)\left(|\boldsymbol{p}\, \Phi|^2 + (e^2/c^2)\,(U + V)^2\, |\Phi|^2\right).\end{aligned} \tag{38}$$

Die rechte Seite, welche stets positiv ist, hat in konservativen Systemen die Bedeutung einer Dichte der kinetischen Teilchenenergie.

Mittels partieller Integration bestätigt man, daß das räumliche Integral der Lagrange-Dichte verschwindet, während das der Hamilton-Dichte den Erwartungswert der Teilchenenergie ergibt.

8. Das Problem der Eichinvarianz

Die vorliegende Theorie kann nicht invariant gegen allgemeine Eichtransformationen sein, weil (11), (12) und (13) dies nicht zulassen. Man kann aber zeigen, daß Invarianz in Bezug auf solche Transformationen besteht, welche die Massenfunktion $m(\boldsymbol{r}, t)$ nur sehr wenig ändern.

Die elektromagnetischen Potentiale transformieren sich bekanntlich gemäß den Beziehungen:

$$\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r}, t) = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) + \operatorname{grad} \varphi(\boldsymbol{r}, t)\,, \tag{39}$$

$$U' + V'(\boldsymbol{r}, t) = U + V(\boldsymbol{r}, t) - (\partial\, \varphi(\boldsymbol{r}, t)/\partial t)\,. \tag{40}$$

Die Masse m transformiert sich dann gemäß

$$\begin{aligned}m'(\boldsymbol{r}, t) &= m(\boldsymbol{r}, t) - (e/c^2)\,(\partial \varphi/\partial t) \\ &= m(\boldsymbol{r}, t)\,(1 - \varkappa(\boldsymbol{r}, t))\,.\end{aligned} \tag{41}$$

Es soll vorausgesetzt werden, daß

$$|\varkappa| = |(e\, \dot{\varphi}/m c^2)| \ll 1 \tag{42}$$

gilt. Im Hamilton-Operator transformieren sich die einzelnen Bestandteile folgendermaßen:

$$\boldsymbol{p}' = \boldsymbol{p} + e \operatorname{grad} \varphi\,, \tag{43}$$

$$\begin{aligned}(1/m') &= (1/m)\,(1 - \varkappa)^{-1} \\ &= (1/m)\,(1 + \varkappa) + O(\varkappa^2)\,.\end{aligned} \tag{44}$$

Wegen (42) kann man hier die Entwicklung nach dem in $\varkappa$ linearen Glied abbrechen. In der Funktion $G'(\boldsymbol{r}, t)$, die sich in der Form

$$\begin{aligned}G'(\boldsymbol{r}, t) = &\left(\hbar^2/2\,\sqrt{m'}\right) \Delta \left(1/\sqrt{m'}\right) \\ &+ (c^2/2)\,((m' - (m_0^2/m'))\end{aligned} \tag{45}$$

darstellen läßt, kann man im ersten Term von der sehr kleinen Massenänderung absehen, da dieser Term ohnehin schon sehr klein ist. Mit (41) und (44) erhält man dann

$$G'(\boldsymbol{r},t) = G(\boldsymbol{r},t) - (\varkappa c^2/2)(m + (m_0^2/m)) + O(\varkappa^2). \tag{46}$$

Damit ergibt sich die transformierte Wellengleichung

$$H'\,\Phi'(\boldsymbol{r},t) = i\hbar\,(\partial/\partial t)\,\Phi'(\boldsymbol{r},t) \tag{47}$$

mit dem Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} H' = {} & (1+\varkappa)\,\boldsymbol{p}'\cdot(1/2m)\,\boldsymbol{p}' - (i\hbar/2m)\operatorname{grad}\varkappa\cdot\boldsymbol{p}' \\ & - G(\boldsymbol{r},t) + (\varkappa c^2/2)(m + (m_0^2/m)). \end{aligned} \tag{48}$$

Da $\varkappa$ eine sehr kleine Größe ist, gilt in niedrigster Näherung, d. h. für $\varkappa \to 0$:

$$\boldsymbol{p}'\cdot(1/2m)\,\boldsymbol{p}'\,\Phi' = (c^2/2)(m - (m_0^2/m))\,\Phi' + i\hbar\dot{\Phi}'. \tag{49}$$

Dies kann man benutzen, um den Term $\varkappa\,\boldsymbol{p}'\cdot(1/2m)\,\boldsymbol{p}'\Phi'$ umzuformen. Man erhält dann mit (41) bis auf Glieder höherer Ordnung in $\varkappa$:

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{p}'\cdot(1/2m)\boldsymbol{p}' - G(\boldsymbol{r},t) - e\dot{\varphi} - (i\hbar/2m)\operatorname{grad}\varkappa\cdot\boldsymbol{p}')\,\Phi' \\ = i\hbar\,\dot{\Phi}'\,(1+\varkappa). \end{aligned} \tag{50}$$

Nun ist wegen (12) und (32) das Glied $|\hbar\,\dot{\Phi}'|$ schon sehr klein, sodaß man $|\varkappa\hbar\,\dot{\Phi}'|$ als ein von höherer Ordnung kleines Glied vernachlässigen darf. Es gelte ferner

$$|\hbar\operatorname{grad}\varkappa\cdot\boldsymbol{p}'\Phi'| \ll p^2\,|\varkappa\Phi'| = 2m\,G\,|\varkappa\Phi'|. \tag{51}$$

Dann erhält man

$$(\boldsymbol{p}'\cdot(1/2m)\,\boldsymbol{p}' - G(\boldsymbol{r},t) - e\dot{\varphi})\,\Phi' = i\hbar\,\dot{\Phi}'. \tag{52}$$

Diese Wellengleichung wird erfüllt durch die Lösung

$$\Phi'(\boldsymbol{r},t) = \Phi(\boldsymbol{r},t)\exp\,[(-\,ie/\hbar)\,\varphi(\boldsymbol{r},t)]. \tag{53}$$

Hieraus folgt unmittelbar, daß die Teilchendichte eine Invariante in bezug auf Eichtransformationen ist. Für die Teilchenstromdichte erhält man

$$\boldsymbol{j}'(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)\,(1 + \varkappa(\boldsymbol{r},t)). \tag{54}$$

Sie ist nicht streng invariant, sondern nur in der Näherung, in der man $\varkappa\boldsymbol{j}$ vernachlässigen kann.

Die Abschätzung (51) läßt sich mit $|\boldsymbol{p}'\Phi'| \approx |p\Phi'|$ noch vereinfachen. Man erhält damit

$$|\operatorname{grad}\varkappa| \ll (p/\hbar)\,|\varkappa|. \tag{55}$$

Die Vernachlässigung ist also erlaubt, wenn sich die Funktion $\varkappa(\boldsymbol{r},t)$ innerhalb einer Elektronenlängenwelle praktisch nicht ändert. Im Rahmen dieser sehr schwachen Einschränkung und der Bedingung (42) ist die Eichinvarianz der Theorie gewährleistet.

Als Sonderfall der Formeln (39) bis (55) ergibt sich, daß für $\varkappa \equiv 0$, also für $\varphi = \varphi(\boldsymbol{r})$ und damit für $m' = m$ die Eichinvarianz streng gilt.

9. Die kräftefreie Teilchenbewegung

Im Fall der kräftefreien Bewegung $[V(\boldsymbol{r},t) \equiv 0,\ \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) \equiv 0]$ werden die beiden Wellengleichungen (14) und (22) bis auf einen bedeutungslosen konstanten Faktor identisch. Es gilt

$$-(\hbar^2/2m)\,\Delta\,\psi(\boldsymbol{r},t) - (p^2/2m)\,\psi(\boldsymbol{r},t) = i\hbar\,\dot{\psi}(\boldsymbol{r},t) \tag{56}$$

mit $m = m_0 + (e/c^2)\,U = \text{const}$, $p^2 = (m^2 - m_0^2)\,c^2 = \text{const}$. Eine mögliche Lösung ist die ebene Welle

$$\psi = A\exp\,(ikz - i\omega(k)t). \tag{57}$$

(Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann man die z-Achse des kartesischen Koordinatensystems stets in Richtung der Wellennormalen legen).

Das Einsetzen von (57) in (56) führt auf die Dispersionsgleichung

$$\omega(k) = (\hbar k^2/2m) - (p^2/2m\hbar). \tag{58}$$

Aus der Einschränkung (12) folgt, daß $\omega(k)$ nur sehr kleine Werte annehmen darf, es muß

$$|\omega(k)| \ll mc^2/\hbar \tag{59}$$

gelten; in (58) sind also die beiden Terme auf der rechten Seite annähernd gleich groß und von der Größenordnung $mc^2/\hbar$. Die Wellengleichung (56) eignet sich nämlich nur zur Beschreibung von Wellenpaketen, deren Spektrum im k-Raum sehr eng begrenzt ist: $|k - k_0| \ll |k_0|$. Speziell gelte für ein ebenes Wellenpaket in z-Richtung

$$\psi(z,t) = \int_{k_0-\delta k}^{k_0+\delta k} a(k-k_0)\exp\,(ikz - i\omega(k)t)\,\mathrm{d}k, \qquad |\delta k| \ll |k_0|. \tag{60}$$

Die Wellenzahl k_0, den Mittelwert im k-Spektrum, wird man der Einfachheit halber so wählen, daß $\omega(k_0)$ verschwindet; nach (58) gilt dann

$$k_0 = (p/\hbar). \tag{61}$$

Für Wellenpakete der Form (60) errechnet sich aus (58) die Gruppengeschwindigkeit zu

$$v = (\mathrm{d}\omega(k)/\mathrm{d}k) = (\hbar k/m), \tag{62}$$

und da k in der Nähe von k_0 liegt, ist die Gruppengeschwindigkeit annähernd gleich der klassischen Teilchengeschwindigkeit p/m. Dasselbe ergibt sich im Rahmen der hier genannten Einschränkungen auch aus der Klein-Gordon-Gleichung, sodaß diesbezüglich keine Diskrepanz besteht. Für die zweite Ableitung von ω nach k, welche die Dispersion des Wellenpakets bestimmt, erhält man hier

$$\omega''(k) = (\hbar/m), \tag{63}$$

während die Klein-Gordon-Gleichung den Wert $\hbar m_0^2 m^{-3}$ ergibt. Diese Diskrepanz ist gewöhnlich nicht von Interesse, da eine genaue Berechnung des Dispersionsverhaltens von Wellenpaketen selten benötigt wird.

10. Anwendungsmöglichkeiten für die relativistische Wellengleichung

a) Bewegung relativistischer Teilchen in statischen elektrischen oder magnetischen Feldern

Man kann in diesem Fall die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion vollständig mit dem Exponentialglied von (11) erfassen, und (14) reduziert sich auf $\boldsymbol{p}^2\,\psi(\boldsymbol{r}) = p^2(\boldsymbol{r})\,\psi(\boldsymbol{r})$. Mit einer Wellengleichung von diesem Typus wurden Beugungs[1]- und Streuvorgänge[2] relativistischer Elektronen ohne Berücksichtigung des Spins errechnet, wobei gewöhnlich von der nichtrelativistischen Schrödinger-Gleichung ausgegangen wird und die relativistische Veränderung von Masse und Wellenlänge als Korrektur hinzugenommen wird. Die in dieser Arbeit dargestellte allgemeinere Theorie gestattet, solche Vorgänge auch nichtstationär, d.h. mit Wellenpaketen endlicher Ausdehnung zu behandeln, wie eine vollständigere Theorie erfordert. Eine Durchführung dieses Programms würde den Rahmen dieser Abhandlung bei weitem übersteigen, weshalb hier darauf verzichtet werden muß.

b) Bewegung relativistischer Teilchen in hochfrequenten elektromagnetischen Feldern

Hier gestattet die Wellengleichung (22) eine Übertragung der Methoden der nichtrelativistischen Theorie auf Wechselwirkungsvorgänge im relativistischen Bereich, sofern dabei der Teilchenspin keine Rolle spielt. Die Näherungsannahme (12) ist erfüllbar für Oszillationsfrequenzen der äußeren elektromagnetischen Felder bis in den Bereich weicher Röntgenstrahlen hinein.

Eine besondere Vereinfachung erzielt man, wenn man durch eine geeignete Eichtransformation das skalare Wechselwirkungspotential $V(\boldsymbol{r},t)$ zum Verschwinden bringt, wodurch das Vektorpotentialfeld $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ quellfrei und damit transversal wird. Dann ist $m = \text{const} = M$; der Unterschied zwischen den Wellenfunktionen $\psi(\boldsymbol{r},t)$ und $\Phi(\boldsymbol{r},t)$ verschwindet und man erhält die Wellengleichung in der Form $\boldsymbol{p}^2\,\psi = p^2\,\psi + 2\hbar m i\dot{\psi}$, wobei neben m auch p eine Konstante ist. In anderen Fällen, wo man das skalare Potential $V(\boldsymbol{r},t)$ nicht ohne weiteres zum Verschwinden bringen kann, muß man dagegen den allgemeineren Formalismus verwenden.

c) Anwendung auf die Bewegung anderer Arten geladener Teilchen

Die Wellengleichung (14) bzw. (22) wurde aus der Diracschen Gleichung für Elektronen durch Vernachlässigung von Spineffekten gewonnen. Damit fallen charakteristische Eigenschaften der Elektronen fort, die Wellengleichung hat dann einen größeren Gültigkeitsbereich. Sie kann beispielsweise auch auf die relativistische Bewegung von Protonen angewandt werden, wenn man die Ladung $-e$ durch $+e$ ersetzt. Allgemein eignet sie sich zur wellenmechanischen Beschreibung der Bewegung aller Arten geladener Teilchen.

Zusammenfassung

Als Resultat dieser Arbeit ist festzustellen, daß die aus der nichtrelativistischen Wellenmechanik bekannten Methoden sich in relativ einfacher Weise so verallgemeinern lassen, daß sie auch in relativistischen Bereichen anwendbar werden, sofern man auf die Lorentzinvarianz der entstehenden Formeln verzichtet und sich dabei auf Vorgänge mit geringer Energieunschärfe beschränkt. Wenngleich dieses Resultat nicht prinzipiell neu ist, so dürfte die in dieser Arbeit dargestellte einfache Systematik der relativistischen Wellenmechanik doch von Interesse sein.

[1] Siehe z.B. W. GLASER, Grundlagen der Elektronenoptik, Springer Verlag, Wien 1952, S. 648ff..

[2] Siehe z.B. F. LENZ, Z. Naturforsch. **9a**, 158 (1954).