Klein, Gordon en de Quantumrelativiteit

Twee grote ontdekkingen aan het begin van de twintigste eeuw waren de formulering van de quantummechanica en die van Einsteins speciale relativiteitstheorie. Dit zijn, respectievelijk, de theorieën van het extreem kleine en het extreem snelle. Een van de grote successen van de daaropvolgende decennia was het verenigen van deze twee theorieën. Vandaag belichten we een van de eerste stappen in die richting: het ontstaan van de Klein-Gordonvergelijking.

Het Oskar Klein Centre. Dit instituut in Stockholm, waar deeltjesfysica, kosmologie en astrofysica wordt bestudeerd, is vernoemd naar een van de ontdekkers van de Klein-Gordonvergelijking.

Een van de hoofdrolspelers in de ontwikkeling van de quantummechanica was Erwin Schrödinger: zijn beroemde Schrödingervergelijking beschrijft hoe de natuur zich op de allerkleinste schaal gedraagt. Materie wordt namelijk op deze schaal niet langer beschreven door een verzameling puntdeeltjes, maar aan de hand van golffuncties. Om te weten hoe een gegeven golffunctie er over twee minuten uitziet (oftewel: hoe die *geëvolueerd* is) moet je de Schrödingervergelijking toepassen – een vergelijking waarover Christian Ventura recent dit lovende artikel schreef. Eén tekortkoming aan deze vergelijking is echter het feit dat ze niet consistent is met Einsteins speciale relativiteitstheorie. In deze theorie zijn tijd en ruimte verenigd in een samenhangend concept genaamd ruimtetijd waarin je niet meer zo makkelijk onderscheid kunt maken tussen de twee. De Schrödingervergelijking maakt dat onderscheid juist wel. In dit artikel zullen we expliciet een relativistische variant van de Schrödingervergelijking afleiden, namelijk de *Klein-Gordonvergelijking*. Daarbij komt wat rekenwerk kijken, dus ga er eens goed voor zitten!

Energie en impuls

Voordat we ontdekken hoe de Klein-Gordonvergelijking tot stand is gekomen moeten we terug naar de speciale relativiteitstheorie van Albert Einstein, geponeerd in zijn gerenommeerde artikel *Zur Elektrodynamik bewegter körper* uit 1905. Een belangrijk resultaat uit dit artikel is dat de energie van materie moet voldoen aan de beroemde energie-impulsrelatie

$$E^2 = (mc^2)^2 + (p c)^2,$$

een andere vergelijking die al eens in een artikel van Christian Ventura ter sprake kwam. Hierin is E de energie van een materiedeeltje, p zijn impuls, en c de lichtsnelheid. Deze relatie staat in sterk contrast met de klassieke energie-impulsrelatie

$$E = \frac{p^2}{2m},$$

waarvan je snel ziet dat die klopt als je de klassieke resultaten $E = \frac12 m v^2$ en $p = mv$ invult. Laten we kort doornemen hoe deze twee ogenschijnlijk verschillende expressies aan elkaar gerelateerd zijn.

Om te beginnen is Einsteins formule veel breder toepasbaar. Zowel voor deeltjes die zich heel snel voortbewegen als heel langzaam geldt zijn verband. De klassiek relatie is alleen geldig in het tweede geval. Het zou dus zo moeten zijn dat bij lage snelheden, Einsteins relatie te reduceren valt tot de klassieke relatie. Dat gaat als volgt: we weten zoals gezegd dat de impuls[1] $p = mv$ waarbij *v* de snelheid is van het deeltje en *m* zijn massa. Als we dat in Einsteins vergelijking hierboven invullen, kunnen we die expressie herschrijven tot

$$E^2 = m^2 c^2(c^2+v^2).$$

Vervolgens gaan we de wortel trekken aan beide zijden van deze vergelijking. Dit geeft ons een uitdrukking voor de energie:

$$E = mc\sqrt{c^2+v^2}.$$

Als we nu dan aannemen dat v heel veel kleiner dan *c* is het handig om de vergelijking te schrijven als

$$E = mc^2\sqrt{1+\frac{v^2}{c^2}}.$$

Wat we vervolgens doen is het toepassen van een bekende wiskunde truc genaamd de *Taylorontwikkeling*. Deze truc vertelt ons dat $\sqrt{1+x} \simeq 1+\frac12 x$ indien x heel veel kleiner is dan 1. In ons geval hebben we als *x* de verhouding v^2/c^2, die duidelijk veel kleiner dan 1 is aangezien *c* met 300.000 kilometer per seconde een gigantisch groot getal is, veel groter dan onze alledaagse snelheid *v*. Als we dus de Taylorontwikkeling toepassen, vinden we de benadering

$$E \simeq mc^2+ \frac12 mv^2.$$

De eerste term noemen we de *rustenergie*, en de tweede is de bekende kinetische energie die we hierboven ook al tegenkwamen. Als we deze tweede expressie weer terugschrijven naar $p = mv$ krijgen we

$$E \simeq mc^2+ \frac{p^2}{2m}.$$

Naast de rustenergie mc^2 vinden we dus onze klassieke energie $p^2/2m$ weer terug!

Een quantumvariant

Laten we nu de tijd met twintig jaar vooruitspoelen. Dan komen we bij onze tweede belangrijke mijlpaal: de formulering van de beroemde Schrödingervergelijking, die we net al noemden,

$$i \hbar \frac{d}{dt} \psi = \hat{H} \psi.$$

Zoals gezegd beschrijft de Schrödingervergelijking hoe een *golffunctie* ψ verandert in de loop van de tijd. Het getal *i* is een complex getal, waarvan het kwadraat -1 is, maar dat getal speelt in wat volgt geen grote rol. Een andere interessante eigenschap die deze vergelijking kent is het feit dat de zogeheten *Hamiltoniaan H* geen getal maar een *operator* is. Dat betekent dat hij 'werkt' op een golffunctie en je dan een nieuwe functie teruggeeft – bijvoorbeeld de oorspronkelijke functie vermenigvuldigd met een getal. In het geval van de Hamiltoniaan is dat getal de energie *E* van het deeltje:

$$\hat{H}\psi = E\psi.$$

We noemen dit ook wel een eigenwaardevergelijking: de *operator* H werkt op de *eigenfunctie* ψ en genereert daarbij de *eigenwaarde* E. Een interessante – en voor dit verhaal relevante – manier van kijken naar deze vergelijkingen is om $i \hbar \frac{d}{dt}$ ook te interpreteren als een operator: de quantummechanische operator die bij de energie hoort, aangezien we net gezien hebben dat

$$\hat{H}\psi = i \hbar \frac{d}{dt} \psi = E\psi.$$

Er bestaat ook een quantummechanische operator die bij de impuls hoort, namelijk

$$\hat{p} \psi = -i \hbar \frac{d}{dx} \psi = p \psi.$$

De eigenwaarde van deze operator is – al zullen we dat hier niet bewijzen – dus de impuls *p*. Waar de $\frac{d}{dt}$ in de eerste vergelijking hierboven staat voor de verandering in de tijd, staat de $\frac{d}{dx}$ nu voor de verandering in de plaats x. Met behulp van deze operatoren kunnen we nu dus een quantummechanische versie van de energie-impulsrelaties produceren. In het geval van de klassieke relatie $E = p^2/2m$ vinden we

$$\hat{H}\psi = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi,$$

wat de gebruikelijke vorm van de Hamiltoniaan is in niet-relativistische quantummechanica. Als we echter onze relativistische energie-impuls relatie gebruiken, dan vinden we

$$\hat{H}^2 \psi = m^2 c^4 \psi + c^2 \hat{p}^2 \psi.$$

We kunnen nu de uitdrukkingen voor de operatoren $\hat{H}$ en $\hat{p}$ invullen en dan zien dat

$$-\hbar^2 \frac{d^2}{dt^2} \psi = m^2 c^4 \psi - c^2 \hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \psi.$$

Hierbij hebben we gebruik gemaakt van het feit dat $i^2=-1$ – dat is namelijk het bekende imaginaire getal – en zien we dat de *enkele* afgeleide $\frac{d}{dt}$ nu verandert in een *dubbele* afgeleide $\frac{d^2}{dt^2}$ – wat ook opgaat voor $\frac{d^2}{dx^2}$. Ten slotte kunnen we de termen verschuiven om tot de volgende uitdrukking te komen

$$\left(-\frac{1}{c^2}\frac{d^2}{dt^2} + \frac{d^2}{dx^2}\right)\psi = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi.$$

Hierbij hebben we de ‘impuls’ term van de rechterzijde naar links gebracht en de gehele uitdrukking gedeeld door $\hbar^2 c^2$. Er ontbreekt dan nog één stap: deze vergelijking houdt slechts rekening met twee dimensies: één tijdsdimensie *t* en één ruimtedimensie *x*. Als we de uitdrukking willen generaliseren naar vier dimensies – één keer tijd en drie keer ruimte *(x, y, z)* – dan kunnen we dat eenvoudig doen door de $\frac{d^2}{dx^2}$ te vervangen door

$$\nabla^2 = \frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}+\frac{d^2}{dz^2}.$$

Dit object heet de Laplace-operator en bevat nu dubbele afgeleiden naar alle drie de ruimtecoördinaten. Als we deze laatste verandering toepassen eindigen we met

$$\left(-\frac{1}{c^2}\frac{d^2}{dt^2} + \nabla^2 \right)\psi = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi.$$

De Klein-Gordonvergelijking

Daarmee is onze lange rekentocht ten einde en zijn we uitgekomen bij de Klein-Gordonvergelijking, ook wel een *relativistische golfvergelijking* genoemd. De vergelijking is relativistisch in de zin dat de variaties in ruimte en tijd aan de linkerzijde nagenoeg op gelijk voet staan. De vergelijking vertelt ons dus hoe een golffunctie zich verplaatst door ruimte *en* tijd. Toen Oskar Klein en Walter Gordon deze vergelijking in 1926 poneerden hoopten zij dat het een correcte quantumbeschrijving zou geven van het elektron in een waterstofatoom. Dat bleek echter niet het geval, omdat voor een correcte beschrijving van het elektron ook de zogenaamde *spin* moet worden meegenomen in de berekening. De Klein-Gordonvergelijking is echter wel geschikt voor het beschrijven van deeltjes die geen spin ('spin 0') hebben, zoals het Higgsboson of het pion-deeltje.

Wat we dus gezien hebben is dat we, als we de klassieke energie-impulsrelatie quantiseren, de oorspronkelijke Schrödingervergelijking terugvinden. Als we echter de relativistische energie-impulsrelatie quantiseren, dan komen we uit bij de Klein-Gordonvergelijking, die diverse deeltjes in de natuur beschrijft – bij alle mogelijke snelheden. Al met al was deze constructie een van de eerste grote stappen op weg naar het verenigen van de quantummechanica met Einsteins speciale relativiteitstheorie. In het volgende hoofdstuk van dit verhaal zal de wereldberoemde natuurkundige Paul Dirac een hoofdrol spelen. Geïnspireerd door het werk van Klein en Gordon wist hij uiteindelijk de laatste stap te zetten die leidde tot een relativistische golfvergelijking voor het elektron. Daarover binnenkort meer!

---

[1] Eigenlijk hebben we hier te maken met de relativistische impuls, maar bij lage snelheden is die nagenoeg gelijk aan de klassieke impuls \(p = mv \).