Dirac-Gleichung und Quantisierung des freien Dirac-Feldes

Jürgen Wieferink
wieferink@uni-muenster.de

15. Mai 2002

Zusammenfassung

Bei der Dirac-Gleichung (Dirac 1928) handelt es sich um eine Differentialgleichung, mit der relativistische Elektronen beschrieben werden. Sie erklärt zwanglos, warum es sich beim Elektron um ein Spin-Einhalb-Teilchen handelt, und fordert die Existenz des Positrons.

Bei der Quantisierung des freien Dirac-Feldes handelt es sich um eine sogenannte „zweite Quantisierung“, bei der nicht nur die Observablen, sondern auch die Wellenfunktionen als Operatoren aufgefasst werden. Das führt uns zu Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, die im Fock-Raum wirken.

Inhaltsverzeichnis

1 Konventionen

In dieser Ausarbeitung sind die Fundamentalen Konstanten $\hbar$ und c gleich Eins gesetzt. Ich werde häufig die in der speziellen Relativitätstheorie übliche Tensorschreibweise benutzen. Dabei bezeichnet ein griechischer Index (z. B. μ) eine beliebige Komponente von Null bis Drei, ein lateinischer Index (z. B. i) aber eine Komponente von Eins bis Drei. Ein Vektorpfeil deutet an, dass es sich um einen Dreiervektor handelt. Eine Vektorgröße, die gar keine Kennzeichnung trägt, bezeichnet den Vierervektor. Über doppelt vorkommende Indizes wird nach Einstein-Konvention summiert.

Mit xp ist das Skalarprodukt aus Raumzeitpunkt x und Viererimpuls p gemeint:

$$px = p_\mu x^\mu = p^0 x^0 - \vec{p} \cdot \vec{x} = \omega t - \vec{k} \cdot \vec{x} \tag{1}$$

Ich versuche, den Operatorhut bei allen Operatoren zu benutzen, die auf Zustands-Hilberträume wirken. Im Wesentlichen werden das die einzigen Operatoren mit Hut sein, mit gelegentlicher Ausnahme des Impulsoperators, für den Fall, dass die Gefahr einer Verwechslung besteht. Das führt dazu, dass Operatoren im Spinor-Raum nicht gesondert gekennzeichnet sind.

2 Die Dirac-Gleichung

2.1 Die Pauli-Theorie des Elektrons

In der nicht-relativistischen Quantenmechanik wird das Elektron durch die Pauli-Gleichung beschrieben (ohne Spin-Bahnwechselwirkung und äußeres Feld):

$$\hat{E}\psi(x) = \boxed{i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x) = -\frac{1}{2m}\Delta_{\vec{x}}\,\psi(x)} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}\psi(x) \tag{2}$$

Bei ψ handelt es sich um einen Zweier-Spinor:

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix}$$

Die Schrödingergleichung ist also eine partielle Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit und zweiter Ordnung im Ort, die auf einen Zweier-Spinor wirkt.

Im wesentlichen folgt dies aus der klassischen Energie-Impuls-Beziehung $E = \vec{p}^2/2m$ und dem Ersetzen von Energie und Impuls durch die zugehörigen Operatoren (kovariant geschrieben):

$$\boxed{\hat{p}_\mu = i\partial_\mu} \tag{3}$$

Über den Spinoperator $\vec{S} = \vec{\sigma}/2$ wird dem Elektron ein Eigendrehimpuls zugeordnet, um den experimentellen Befunden gerecht zu werden. Dabei ist $\vec{\sigma}$ ein Dreiervektor von Pauli-Spinmatrizen:

$$\begin{aligned} \sigma^1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma^2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma^3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{4}$$

Diese Spin-Matrizen erfüllen folgende Vertauschungs- und Antivertauschungsregeln:

$$[\sigma^i, \sigma^j] = 2\,i\,\epsilon^{ijk}\,\sigma^k \qquad \{\sigma^i, \sigma^j\} = 2\,\delta^{ij} \tag{5}$$

2.2 Relativistische Verallgemeinerung

Da Gleichung (2) in Zeit und Ort von verschiedenen Ordnungen ist, kann sie nicht relativistisch invariant sein.

Der Ansatz von Dirac ist es, eine lineare Gleichung erster Ordnung sowohl in Zeit als auch im Ort aufzustellen. Wir versuchen einen Gleichung (2) entsprechenden Ansatz mit:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x) = \left(\vec{\alpha} \cdot \frac{1}{i}\vec{\nabla} + \beta m\right)\psi(x) \tag{6}$$

Das ψ ist dabei ein n-komponentiger Spinor, α^i und β sind noch zu bestimmende Matrizen im Spinor-Raum.

Wir wollen Gleichung (6) kovariant formulieren. Dazu multiplizieren wir die Gleichung von links mit β^{-1} und definieren $\gamma^0 := \beta^{-1}$ und $\gamma^i := \beta^{-1}\alpha^i$. Wir erhalten nach umstellen die kovariante Form der freien Dirac-Gleichung:

$$\boxed{(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi(x) = 0} \tag{7}$$

Bis jetzt ist aber noch ungeklärt, wie groß n, also die Dimension des Spinor-Raumes von ψ ist, und welche Anforderungen wir an γ stellen müssen. Wir wissen nur, dass γ^μ für jedes einzelne μ eine $n \times n$-Matrix im Spinor-Raum ist.

Wir wollen fordern, dass jede Lösung der Dirac-Gleichung (7) auch Lösung der Klein-Gordon-Gleichung

$$\begin{aligned} 0 &= (\Box + m^2)\psi(x) = (\partial^\mu \partial_\mu + m^2)\psi(x) \\ &= (g^{\mu\nu}\partial_\mu \partial_\nu + m^2)\psi(x) \end{aligned} \tag{8}$$

ist, um die relativistische Energie-Impuls-Beziehung sicherzustellen. Dazu multiplizieren wir (7) von links mit $(-i\gamma^\nu \partial_\nu - m)$ und beachten, dass die ∂_μ vertauschen, nicht aber die γ^μ:

$$\begin{aligned} 0 &= (-i\gamma^\nu \partial_\nu - m)(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi(x) \\ &= \left(\frac{1}{2}(\gamma^\nu\gamma^\mu + \gamma^\mu\gamma^\nu)\partial_\nu\partial_\mu + m^2\right)\psi(x) \\ &= \left(\frac{1}{2}\{\gamma^\nu, \gamma^\mu\}\partial_\nu\partial_\mu + m^2\right)\psi(x) \end{aligned} \tag{9}$$

Vergleicht man dies mit der Klein-Gordon-Gleichung (8), so erhält man die Forderung

$$\boxed{\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\, g^{\mu\nu}\mathbf{1}} \tag{10}$$

für die γ^μ. Das bedeutet insbesondere $\gamma^0\gamma^0 = \mathbf{1}$, $\gamma^i\gamma^i = -\mathbf{1}$ und $\gamma^\mu\gamma^\nu = -\gamma^\nu\gamma^\mu$ für $\mu \neq \nu$.

Man kann zeigen, dass diese Bedingungen nicht für $n < 4$ erfüllt werden können. Man benutzt daher nach Konvention $n = 4$ und

$$\gamma^0 = \left(\begin{array}{c|c} \mathbf{1}_2 & 0 \\ \hline 0 & -\mathbf{1}_2 \end{array}\right) \qquad \gamma^i = \left(\begin{array}{c|c} 0 & \sigma^i \\ \hline -\sigma^i & 0 \end{array}\right). \tag{11}$$

Man sieht leicht, dass diese Wahl nicht eindeutig ist, wenn man eine nichtsinguläre Matrix S vorgibt, und die Matrizen $S^{-1}\gamma^\mu S$ betrachtet. Diese erfüllen dann ebenfalls (10).

Im folgenden ist mit „Spinor" immer ein Viererspinor gemeint, und die γ^μ bleiben wie in (11) definiert.

Um ein klassisches elektromagnetisches Feld zu berücksichtigen, müssten wir nur, wie im nichtrelativistischen Fall, den Impulsoperator $\hat{p}_\mu$ in

$$(\gamma^\mu \hat{p}_\mu - m)\psi(x) = 0$$

durch $\hat{p}_\mu + eA_\mu$ ersetzen. Wir wollen uns hier aber nur mit der freien Dirac-Gleichung (7) beschäftigen.

3 Lösung der freien Dirac-Gleichung

3.1 Ansatz

Wir suchen die stationären Lösungen der freien Dirac-Gleichung (7). Das sind die Lösungen fester Energie. Wir erwarten natürlich, dass die Energie im allgemeinen entartet ist, da freie Teilchen mit gleichem Impulsbetrag, aber unterschiedlicher Richtung, wie im klassischen Fall die gleiche Energie haben sollten. Außerdem wissen wir bereits jetzt, dass das Elektron noch einen Spin-Freiheitsgrad hat, der auch energieentartet ist.

Als Ansatz wählen wir eine ebene Welle mit dem Viererimpuls p:

$$\psi^{(+)}(x) = e^{-ipx}u_s(p) \tag{12}$$

Damit steckt die gesamte Ortsabhängigkeit in der Exponential-Funktion, während der Spinor-Charakter in $u_s(p)$ steckt.

Weil wir fordern wollen, dass die Energie positiv definit ist ($p^0 > 0$), ist mit (12) noch nicht der gesamte Funktionenraum erzeugt. Dieser Ansatz entspricht den sogenannten „positiven" Energielösungen. Für die „negativen Energielösungen" machen wir den Ansatz

$$\psi^{(-)}(x) = e^{ipx}v_s(p), \tag{13}$$

bei dem wir wiederum $p^0 > 0$ fordern.

Wir werden im Folgenden nur die positiven Energielösungen behandeln. Die negativen werden analog gelöst.

3.2 Mögliche Eigenwerte

Setzen wir unseren Ansatz für $\psi^{(+)}$ (12) in die Dirac-Gleichung (7) ein, so erhalten wir die algebraische Gleichung:

$$0 = (\gamma^\mu p_\mu - m)u_s(p) =: (\not{p} - m)u_s(p) \tag{14}$$

Dabei ist $(\not{p} - m)$ eine Matrix der Gestalt

$$(\not{p} - m) = \left(\begin{array}{c|c} (p^0 - m)\mathbf{1} & -\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \\ \hline \vec{\sigma}\cdot\vec{p} & -(p^0 + m)\mathbf{1} \end{array}\right). \tag{15}$$

Um die erlaubten Eigenwerte p zu bekommen, müssen wir $(\det(\not{p} - m))$ Null setzen. Wir erhalten also mit

$$0 = \det(\not{p} - m) = (p^2 - m^2)^2 = (E^2 - \vec{p}^2 - m^2)^2$$

das charakteristische Polynom in $p^0 = E$, das zwei doppelte Nullstellen hat. Die verwendete Rechnung dazu würde den Rahmen dieser Ausarbeitung sprengen, es ist aber einzusehen, dass wir nur Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung (8) erhalten können, aber insgesamt vier Lösungen erhalten müssen. Das charakteristische Polynom hat daher nicht unerwartet eine doppelte Nullstelle bei

$$p^0 = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2}, \tag{16}$$

und die andere doppelte Nullstelle unterscheidet sich nur im Vorzeichen. Die beiden positiven Lösungen werden hier abgehandelt, für die anderen beiden Lösungen wird Ansatz (13) verwendet, so dass man wiederum mit $p^0 > 0$ rechnen kann.

Über die relativistische Energie-Impuls-Beziehung (16) hängt die Energie p^0 eindeutig mit dem Impuls $\vec{p}$ zusammen. Wir werden im weiteren statt $u_s(p)$ lieber $u_s(\vec{p})$ schreiben, weil die Abhängigkeit von p^0 redundant ist.

3.3 Lösung im Ruhesystem

Um ein Gefühl für die Lösungen zu bekommen, betrachten wir zunächst das Ruhesystem ($\vec{p} = 0, p^0 = m$). Es ergibt sich als algebraisches Gleichungssystem:

$$(\not{p} - m)u(\vec{p} = 0) = \left(\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 0 & -2m\mathbf{1} \end{array}\right) u(0) = 0 \tag{17}$$

Wir erkennen, dass es für $u_s(\vec{p} = 0)$ genau zwei linear unabhängige nichttriviale Lösungen gibt, nämlich nach Normierung:

$$u_s = \sqrt{2m} \left(\frac{\chi_s}{0}\right) \tag{18}$$

Dabei definieren wir die χ_s mit

$$\chi_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{19}$$

und fassen die beiden unabhängigen Lösungen als verschiedene Spinzustände auf. Dass dies richtig ist, werden wir weiter unten sehen.

3.4 Lösung in beliebigem System

Man könnte sich nun überlegen, wie sich die Wellenfunktion unter Lorentz-Transformation verhält, und die Ruhelösung transformieren, um die allgemeine Lösung mit scharfen Impuls zu erhalten. Wir wollen hier aber die Transformation erst behandeln, wenn wir die Struktur der Lösungen und damit der Wellenfunktionen schon gesehen haben.

In einem bewegten System haben wir wegen $\vec{p} \neq 0$ die algebraische Gleichung:

$$\left(\begin{array}{c|c} (p^0 - m) & -\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \hline \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & -(p^0 + m) \end{array}\right) \left(\frac{\xi}{\eta}\right) = 0 \tag{20}$$

Die Blockmatrizen ausmultipliziert ergibt sich:

$$(p^0 - m)\xi - (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\eta = 0 \tag{21}$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\xi - (p^0 + m)\eta = 0 \tag{22}$$

Wenn wir (22) nach η umstellen

$$\eta = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{p^0 + m}\xi \tag{23}$$

und in Gleichung (21) einsetzen, so ist diese identisch erfüllt. Wir können also ξ frei wählen, so dass es mit η aus (23) Lösung wird. Das bedeutet für $u_s(\vec{p})$ mit Normierung:

$$\boxed{u_s(\vec{p}) = +\sqrt{p^0 + m} \left(\frac{\chi_s}{\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{p^0 + m}\chi_s}\right)} \tag{24}$$

Für $v_s(\vec{p})$ ergibt sich analog:

$$\boxed{v_s(\vec{p}) = -\sqrt{p^0 + m} \left(\frac{\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{p^0 + m}\epsilon\, \chi_s}{\epsilon\, \chi_s}\right)} \tag{25}$$

Dabei ist ϵ eine 2×2-Matrix, die eingeführt wurde, damit die Spin-Projektion auf die z-Achse dem Wert von s entspricht (wie wir später sehen werden):

$$\epsilon = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{26}$$

Die Normierung ist so gewählt, dass

$$u_s^\dagger(\vec{p})\gamma^0 u_s(\vec{p}) = v_x^\dagger(\vec{p})\gamma^0 v_s(\vec{p}) = 2m. \tag{27}$$

Mit

$$\boxed{\begin{aligned} \psi(x) = \sum_s \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3\, 2p^0} * \\ * \left\{e^{ipx} v_s(\vec{p})\beta_s^*(\vec{p}) + e^{-ipx} u_s(\vec{p})\alpha_s(\vec{p})\right\} \end{aligned}} \tag{28}$$

erhalten wir so die allgemeine Lösung, wobei α_s und β_s^* beliebige komplexe Funktionen sind.

Das $(2\pi)^3$ im Nenner von (28) ist Konvention und hat hier den Zweck, die Rück-Fouriertransformation möglichst einfach werden zu lassen. Häufig wird auch auf beiden Seiten $(2\pi)^{3/2}$ verwendet. Das $2p^0$ steht im Nenner, um den Ausdruck invariant unter Lorentz-Transformation werden zu lassen.

3.5 Interpretation der Lösung

Die positiven Energielösungen entsprechen den erwarteten Elektronen. Es zeigt sich, dass die negativen Energielösungen zu den Positronen, also den Anti-Elektronen führen, die dieselbe Masse, aber entgegengesetzte Ladung haben.

Wir wollen uns die Formel für $u_s(\vec{p})$ (24) für den nicht-relativistischen Grenzfall anschauen. In diesem Fall sind die Ortskomponenten des Vierimpulses $\vec{p}$ um die Ordnung $(v/c)^2$ kleiner als die Energie p^0 oder die Masse m. Wenn wir (24) nach (v/c) entwickeln, und alle Terme der Ordnung $O((v/c)^2)$ vernachlässigen, und somit zu einer Zwei-Komponenten-Schreibweise übergehen können, geht die Dirac-Gleichung (7) in die Schrödinger-Gleichung (2) über.

Berücksichtigt man noch die quadratischen Terme und vernachlässigt erst die $O((v/c)^4)$-Terme, so erhält man noch die Spin-Bahn-Wechselwirkung.

Lassen wir dagegen $\vec{p}$ gegen Null gehen, so erhalten wir, wie nicht anders erwartet, die Lösung für das Ruhesystem (18).

4 Transformationsverhalten des Dirac-Spinors

4.1 Allgemeines zum Transformationverhalten

Wir wollen uns nun anschauen, was mit der Dirac-Gleichung (7) bei einer Lorentz-Transformation

$$x^\mu \longrightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu \tag{29}$$

geschieht. Wir kümmern uns hier nicht um die etwas allgemeinere Poincaré-Transformation, weil sie keine neue Physik liefert. Als ersten Versuch nehmen wir an, dass sich $\psi(x)$ genau wie ein Skalarfeld $\varphi(x)$

$$\varphi(x) \longrightarrow \varphi'(x') = \varphi(x) = \varphi(\Lambda^{-1}x') \tag{30}$$

transformiert, also:

$$\psi(x) \longrightarrow \tilde{\psi}(x') = \psi(x) = \psi(\Lambda^{-1}x') \tag{31}$$

Wenden wir die Lorentztransformation (29) auf die Dirac-Gleichung (7) an, so erhalten wir:

$$\{i(\Lambda^\mu{}_\nu\gamma^\nu)\partial'_\mu - m\}\,\tilde{\psi}(x') = (i\gamma'^\mu\partial'_\mu - m)\tilde{\psi}(x') = 0 \tag{32}$$

Das Problem bei dieser Form ist, dass die γ^μ mittransformiert werden müssen. Daraus folgt, dass die Notation der Komponenten in $\tilde{\psi}$ dann nicht mehr der Spin-Projektion auf die neue z-Achse entspricht. Damit wäre die Form des Spinors und der Dirac-Gleichung nicht mehr kovariant. Wir versuchen, das Problem zu lösen, indem wir γ^μ so belassen, und statt dessen eine nichtsinguläre Spinormatrix $S(\Lambda)$ finden, mit der wir unseren Spinor $\psi(x)$ transformieren:

$$\psi(x) \longrightarrow \psi'(x') := S(\Lambda)\tilde{\psi}(x') \tag{33}$$

Wir müssen uns nun überlegen, welche Bedingungen das $S(\Lambda)$ erfüllen muss, und ob es immer möglich ist, eines zu finden, so dass wir die Dirac-Gleichung in neuen Koordinaten als

$$(i\gamma^\mu\partial'_\mu - m)\psi'(x') = 0 \tag{34}$$

schreiben können.

Multiplizieren wir (34) von links mit $S^{-1}(\Lambda)$, und schreiben ψ' aus, so erhalten wir (da ∂' nicht im Spinorraum wirkt):

$$(iS^{-1}(\Lambda)\gamma^\mu S(\Lambda)\partial'_\mu - m)\tilde{\psi}(x') = 0 \tag{35}$$

Vergleichen wir nun (35) mit (32), so erhalten wir die Forderung:

$$\Lambda^\mu{}_\nu\gamma^\nu = S^{-1}(\Lambda)\gamma^\mu S(\Lambda) \tag{36}$$

Man kann für infinitesimale Lorentz-Transformationen ($\Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\mu_\nu + \delta h^\mu{}_\nu$) zeigen, dass

$$\boxed{S(\Lambda) = \mathbf{1}_4 - \frac{i}{4}\delta h^{\rho\sigma}\sigma_{\rho\sigma}} \quad \text{mit} \quad \sigma_{\rho\sigma} := \frac{i}{2}[\gamma_\rho, \gamma_\sigma] \tag{37}$$

die Bedingung (36) erfüllt, wenn man ausnutzt, dass für eine infinitesimale Lorentztransformation $\delta h^{\rho\sigma} = -\delta h^{\sigma\rho}$ gilt. Das σ ist dabei eine Matrix sowohl im Spinor- als auch im Minkowski-Raum.

Weil man jede eigentliche orthochrone[1] Lorentztransformation aus infinitesimalen Transformationen erzeugen kann, ist somit die Existenz von $S(\Lambda)$ gesichert.

4.2 Räumliche Drehungen*

Notation einer räumlichen Drehung

Wir wollen nun das eben erarbeitete auf den Spezialfall von rein räumlichen Drehungen anwenden. Eine räumliche Drehung ist gegeben durch eine orthogonale 3×3-Matrix R und die Vorschriften

$$t \longrightarrow t' = t \quad \text{und} \quad x \longrightarrow x'^j = R^j{}_k x^k. \tag{38}$$

Wir untersuchen zunächst den Spezialfall einer Drehung um den infinitesimalen Winkel $\vec{\delta\varphi}$, die gegeben[2] ist durch

$$R^j{}_k = \delta^j_k + \varepsilon^{jkl}\,\delta\varphi^l. \tag{39}$$

Daraus folgt:

$$h^{jk} = -h^j{}_k = -\varepsilon^{jkl}\varphi^l\ , \qquad h^{0\mu} = h^{\mu 0} = 0 \tag{40}$$

Anteil von $S(\Lambda)$

Setzen wir die infinitesimale Drehung (40) in die Gleichung für $S(\Lambda)$ (37) ein,

$$S(R) = \mathbf{1} - \frac{1}{8}\varepsilon^{jkl}\delta\varphi^l[\gamma^j,\gamma^k] \tag{41}$$

erhalten wir wegen (11) und (5)

$$S(R) = \mathbf{1} + i\,\vec{\delta\varphi}\cdot\left(\begin{array}{c|c} \frac{1}{2}\vec{\sigma} & 0 \\ \hline 0 & \frac{1}{2}\vec{\sigma}\end{array}\right) =: \mathbf{1} + \frac{i}{2}\,\vec{\delta\varphi}\cdot\vec{\Sigma}. \tag{42}$$

Anteil der Koordinatentransformation

Ein einfaches Skalarfeld transformiert sich nach (30). Wir fragen uns nun aber, was wir tun müssen, wenn wir bei infinitesimalen Transformationen φ' nach neuen Koordinaten darstellen wollen:

$$\begin{aligned} \varphi'(\vec{x}',t') &= \varphi(\vec{x},t) = \varphi(R^{-1}\vec{x}',t') \\ &= \varphi\left((x'^i - \varepsilon^{ijk}x'^j\,\delta\varphi^k),t'\right) \end{aligned}$$

$$\text{und mit} \quad f(\vec{r}+d\vec{r}) = f(\vec{r}) + d\vec{r}\cdot\vec{\nabla}f(\vec{r})$$

$$\begin{aligned} \varphi'(\vec{x}',t') &= \varphi(\vec{x}',t') - \varepsilon^{ijk}x'^j\delta\varphi^k\frac{\partial}{\partial x'^i}\varphi(\vec{x}',t') \\ &= (1 + \delta\varphi^l\,\epsilon^{jkl}\,x'^j\,\partial'_k)\,\varphi(\vec{x}',t') \\ &=: (1 + i\,\delta\varphi^l\,L^l)\,\varphi(\vec{x}',t') \end{aligned} \tag{43}$$

Wir erkennen hier den Operator des Bahndrehimpulses $\vec{L}$.

Gesamtdrehung

Aus (42) und (43) folgt somit:

$$\begin{aligned} \psi'(\vec{x}',t') &= S(R)\psi(R^{-1}\vec{x}',t') \\ &= (\mathbf{1} + \frac{i}{2}\,\delta\varphi^l\,\Sigma^l)(\mathbf{1} + i\,\delta\varphi^l\,L^l)\,\varphi(\vec{x}',t') \\ &= \left(\mathbf{1} + i\,\delta\varphi^l(L + \frac{1}{2}\Sigma)\right)\varphi(\vec{x}',t') \\ &=: \left(\mathbf{1} + i\,\vec{\delta\varphi}\cdot(\vec{L}+\vec{S})\right)\varphi(\vec{x}',t') \end{aligned} \tag{44}$$

Da infinitesimale Drehungen durch den Gesamtdrehimpulsoperator induziert werden, können wir in (44) eben diesen ablesen, er ergibt sich zu $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, also der Summe von Bahndrehimpuls und dem, was wir jetzt mit dem Spin identifizieren können. Hier sehen wir, dass es sich beim Spin wirklich um einen Drehimpuls handelt.

Der Spin

Damit hat der Spinoperator die Gestalt:

$$\boxed{\vec{S} = \frac{1}{2}\vec{\Sigma} = \frac{1}{2}\left(\begin{array}{c|c} \vec{\sigma} & 0 \\ \hline 0 & \vec{\sigma}\end{array}\right)} \tag{45}$$

Es ist übrigens bemerkenswert, dass die allgemeinen Lösungen (24) und (25) keine scharfe Spin-Projektion haben. Lediglich für den Fall, dass die Impulsrichtung in Quantisierungsachse zeigt, bekommt man scharfe Eigenwerte (einfach nachzuprüfen, wenn man beides auf die z-Achse legt). Dies kann man als die „physikalische“ Ursache der Spin-Bahn-Wechselwirkung auffassen. Für den Fall des Zusammenlegens von Impuls- und

[1] Und nur diese betrachten wir hier.

[2] Die Unterscheidung von kovarianten und kontravarianten Vektoren ist hier schwierig. Ich habe das Problem nicht ganz sauber gelöst.

Spinquantisierungs-Richtung hat man sozusagen $\vec{L} \perp \vec{S}$, also $\vec{L} \cdot \vec{S} = 0$ und damit auch in der Pauli-Theorie keine Spin-Bahnwechselwirkung.

Endliche Drehung

Betrachten wir den Dirac-Spinor am Punkt $\vec{x} = 0$, so müssen wir uns bei einer Drehung nicht um den Bahndrehimpuls zu kümmern und können uns ganz auf den Spin konzentrieren. Eine Drehung um die z-Achse um den infinitesimalen Winkel $\delta\varphi$ sieht dann so aus:

$$\psi'(0,t) = \left\{\mathbf{1} + i\,\delta\varphi\, S^3\right\}\psi(0,t) \tag{46}$$

Für eine endliche Drehung um den Winkel φ ergibt sich somit:

$$\psi'(0,t) = \left\{\exp\left[i\varphi\left(\begin{array}{c|c} \frac{1}{2}\sigma^3 & 0 \\ \hline 0 & \frac{1}{2}\sigma^3 \end{array}\right)\right]\right\}\psi(0,t) \tag{47}$$

Setzen wir nun eine volle Drehung ($\varphi = 2\pi$) ein, erhalten wir:

$$\begin{aligned}\psi'(0,t) &= \left\{\exp\left[\frac{2\pi i}{2}\left(\begin{array}{c|c} \sigma^3 & 0 \\ \hline 0 & \sigma^3 \end{array}\right)\right]\right\}\psi(0,t) \\ &= \left\{\exp\begin{pmatrix} i\pi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i\pi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\pi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i\pi \end{pmatrix}\right\}\psi(0,t) \\ &= (-\mathbf{1})\cdot\psi(0,t) = -\psi(0,t)\end{aligned} \tag{48}$$

Wir erhalten also bei einer Drehung um 360° die ursprüngliche Wellenfunktion, nur mit anderem Vorzeichen. Daraus – neben der Tatsache, dass ψ komplexwertig ist – folgern wir, dass die Wellenfunktion selbst keine direkte physikalische Messgröße sein kann.

Die obigen Berechnungen sind auch für den gesamten Raum gültig, wenn $\psi(x)$ kugelsymmetrisch um $\vec{x} = 0$ im dreidimensionalen Ortsraum ist.

4.3 Physikalische Operatoren

Wir haben im letzten Abschnitt gesehen, dass $\psi(x)$ selbst keine physikalische Messgröße sein kann. Das haben wir natürlich auch nicht erwartet, weil ψ ja komplexwertig ist.

Es stellt sich aber die Frage, wie physikalische Messgrößen in diesem Formalismus aussehen. Natürlich sollten sie reell sein. Wir wollen auch annehmen, dass eine Messgröße erstmal ein Feld darstellt, über das man in einem zweiten Schritt noch integrieren kann. Entscheidend ist aber, dass sich das observable Feld vernünftig unter Lorentz-Transformation verhält.

Als ersten Ansatz könnte man

$$\tilde{A}(x) = \psi^\dagger(x)\tilde{\mathrm{M}}\psi(x) \quad \text{mit} \quad \tilde{\mathrm{M}}^\dagger = \tilde{\mathrm{M}} \tag{49}$$

probieren. Das führt aber zu Problemen, weil $S(\Lambda)$ nicht unitär ist, also im allgemeinen

$$S^{-1}(\Lambda) \neq S^\dagger(\Lambda)$$

gilt. Setzt man das in den Ansatz (49) ein, sieht man schnell das Problem, nämlich dass sich die Transformationsmatrizen nicht herauskürzen.

Wir führen nun die Dirac-Adjunktion ein, die für Spinoren und Spinmatrizen wie folgt aussieht:

$$\begin{aligned}\bar{\psi}(x) &:= \psi^\dagger(x)\gamma^0 \\ \bar{\mathrm{M}} &:= \gamma^0\mathrm{M}^\dagger\gamma^0\end{aligned} \tag{50}$$

Diese hat nämlich den Vorteil, dass $\bar{S}(\Lambda) = S^{-1}(\Lambda)$, und damit transformiert sich ein observables Feld

$$A(x) = \bar{\psi}(x)\bar{\mathrm{M}}\psi(x) \quad \text{mit} \quad \bar{\mathrm{M}} = \mathrm{M} \tag{51}$$

genau so, wie sich M transformiert.

Das M transformiert sich allerdings im Allgemeinen leider nicht so trivial. Man kann es jedoch immer als Linearkombination von „Basismatrizen“ schreiben, die sich auf ihre Weise kovariant verhalten. Mit

$$\begin{aligned}\gamma_5 &:= i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \frac{i}{4!}\varepsilon_{\mu\nu\sigma\rho}\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\sigma\gamma^\rho \\ &= \left(\begin{array}{c|c} 0 & \mathbf{1} \\ \hline \mathbf{1} & 0 \end{array}\right) \quad \text{und} \quad \{\gamma^\mu, \gamma_5\} = 0\end{aligned} \tag{52}$$

gibt es die in Tabelle 1 aufgelisteten 16 Basismatrizen. Das ist so zu verstehen, dass sich zum Beispiel

$$j^\mu(x) = q\bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)$$

(übrigens die Viererstromdichte) genau wie ein Vierervektor transformiert.

Matrix	Anzahl	Transformationsverhalten
$\mathbf{1}$	1	Skalar
γ^μ	4	Vektor
$\sigma^{\sigma\rho}$	6	antisymmetrischer Tensor
$\gamma^\mu\gamma_5$	4	Pseudovektor
$i\gamma_5$	1	Pseudoskalar

Tabelle 1: Basismatrizen für M

Ein wichtiger Operator ist der kanonische Viererimpulsdichteoperator

$$T^\mu{}_\nu = \bar{\psi}(x)\gamma^\mu \hat{p}_\nu \psi(x) = \bar{\psi}(x)\gamma^\mu i\partial_\nu \psi(x). \tag{53}$$

Nun verstehen wir auch die zuerst etwas merkwürdig erscheinende Normierung (27). Wir haben nämlich mit

$$u_s^\dagger(\vec{p})\gamma^0 u_s(\vec{p}) = \bar{u}_s(\vec{p})\mathbf{1}u_s(\vec{p}) = 2m$$

auf beiden Seiten einen Skalar stehen. Nebenbei erwähnt erhält man auch

$$\bar{u}_s(\vec{p})\gamma^\mu u_s(\vec{p}) = 2p^\mu.$$

Außerdem erhalten wir für den Spinoperator (45) bei Anwendung auf $u_s(\vec{p}=0)$ und $v_s(\vec{p}=0)$ folgende Erwartungswerte:

$$\bar{u}_s(0)S^3 u_s(0) = s \qquad \bar{v}_s(0)S^3 v_s(0) = s \tag{54}$$

Das ist übrigens auch der Grund für die Einführung der ϵ-Matrix (26).

5 Quantisierung

5.1 Vorbemerkungen: Feldoperatoren und Heisenberg-Bild*

Im Heisenberg-Bild wird – wie bekannt – die Zeitabhängigkeit in den Operator gezogen. Das heißt, dass $|\psi>$ einen Zustand ohne Zeitabhängigkeit beschreibt, und ein beliebiger Operator $\hat{A}$ geht in $\hat{A}(t)$ über, wobei die Zeitabhängigkeit durch die Heisenberg-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}(t) = i[\hat{H}, \hat{A}(t)] = i[\hat{P}_0, \hat{A}(t)] \tag{55}$$

gegeben. Mit $\hat{P}_\mu$ ist der Gesamtviererimpulsoperator gemeint.

Wir wollen nun den Begriff des Feldoperators einführen. Wir können zum Beispiel der Wahrscheinlichkeitsdichte einen Operator

$$\hat{\rho}(\vec{x}) := \delta^3(\vec{X} - \vec{x})$$

zuordnen, der den Erwartungswert

$$\begin{aligned} <\psi|\,\hat{\rho}(\vec{x})\,|\psi> &= \int d^3X\, \psi^*(\vec{X},t)\delta^3(\vec{X}-\vec{x})\psi(\vec{X},t) \\ &= |\psi(\vec{x},t)|^2 \end{aligned}$$

hat.

Für lokale Operatoren, d. h. Operatoren der Form $\hat{A}(\vec{x}) = F(\vec{X} - \vec{x})$ kann man zeigen, dass gilt:

$$\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x^i}\hat{A}(\vec{x}) = -[\hat{P}^i, \hat{A}(\vec{x})] \tag{56}$$

Man kann nun (55) und (56) zur verallgemeinerten Heisenberg-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu}\hat{A}(x) = \boxed{\partial_\mu \hat{A}(x) = i[\hat{P}_\mu, \hat{A}(x)]} \tag{57}$$

zusammenfassen. Man kann dies nun auch so auffassen, dass aus dem Hilbertraumvektor $|\psi>$ auch die Ortsabhängigkeit gezogen und auf den Operator übertragen wurde, so dass $|\psi>$ wirklich nur noch den Zustand bezeichnet.

5.2 Die „zweite" Quantisierung

Die Quantentheorie baut darauf auf, dass Observablen nicht mehr durch skalare Funktionen sondern durch Hilbertraumoperatoren beschrieben werden. Der entscheidende Schritt der sogenannten „zweiten" Quantisierung ist es, die Wellenfunktion $\psi(x)$ nicht mehr als einfache komplexwertige Funktion aufzufassen, sondern als (Feld-)Operator $\hat{\psi}(x)$ in einem noch zu beschreibenden Hilbertraum.

Zunächst wollen wir die Gültigkeit der allgemeinen Heisenberggleichung

$$\partial_\mu \hat{\psi}(x) = i[\hat{P}_\mu, \hat{\psi}(x)] \tag{58}$$

und der Dirac-Gleichung

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\hat{\psi}(x) = 0 \tag{59}$$

postulieren. Die Operatorform der Dirac-Gleichung

(59) führt dazu, dass wir $\hat{\psi}$ nach (28) zu

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{\psi}(x) = \sum_s \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3\, 2p^0} * \\ * \left\{ e^{ipx}\, v_s(\vec{p})\, \hat{\mathbf{b}}_s^\dagger(\vec{p}) + e^{-ipx}\, u_s(\vec{p})\, \hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p}) \right\}\end{aligned}} \tag{60}$$

entwickeln können, mit $\hat{\mathbf{b}}_s(\vec{p})$ und $\hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p})$ als Operatoren.

Dies entspricht im Wesentlichen der Quantisierung der Klein-Gordon-Gleichung, nur dass wir hier zum einen den zusätzlichen Spin-Freiheitsgrad s haben, und zum anderen $\hat{\mathbf{b}}_s^\dagger(\vec{p})$ nicht das hermitisch konjugierte zu $\hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p})$, weil $\hat{\psi}$ nicht notwendig nur reelle Eigenwerte haben soll.

5.3 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, Fock-Raum

Wenden wir die verallgemeinerte Heisenberg-Gleichung (58) auf die Operator-Entwicklung (60) und ihr konjugiert komplexes an, so erhalten wir folgende Operatoridentitäten:

$$\begin{aligned}
[\hat{P}_\mu, \hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p})] &= p_\mu \hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p}) \\
[\hat{P}_\mu, \hat{\mathbf{b}}_s^\dagger(\vec{p})] &= p_\mu \hat{\mathbf{b}}_s^\dagger(\vec{p}) \\
[\hat{P}_\mu, \hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p})] &= -p_\mu \hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p}) \\
[\hat{P}_\mu, \hat{\mathbf{b}}_s(\vec{p})] &= -p_\mu \hat{\mathbf{b}}_s(\vec{p})
\end{aligned} \tag{61}$$

Wenn wir nun noch einen Vakuumzustand $|\,0>$ mit $<0\,|\,0>= 1$ und $\hat{P}_\mu\,|\,0>= 0$ postulieren, erhalten wir mit (61) folgende Eigenwertgleichungen:

$$\begin{aligned}
\hat{P}_\mu \hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p})\,|\,0> &= p_\mu \hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p})\,|\,0> \\
\hat{P}_\mu \hat{\mathbf{b}}_s^\dagger(\vec{p})\,|\,0> &= p_\mu \hat{\mathbf{b}}_s^\dagger(\vec{p})\,|\,0>
\end{aligned} \tag{62}$$

$$\begin{aligned}
\hat{P}_\mu \hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p})\,|\,0> &= -p_\mu \hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p})\,|\,0> \\
\hat{P}_\mu \hat{\mathbf{b}}_s(\vec{p})\,|\,0> &= -p_\mu \hat{\mathbf{b}}_s(\vec{p})\,|\,0>
\end{aligned} \tag{63}$$

Die Eigenwerte in (63) sind unphysikalisch, weil sie negative Energie haben. Deswegen wollen wir fordern, dass die betreffenden Zustände verschwinden:

$$\boxed{\begin{aligned}
\hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p})\,|\,0> = 0 \\
\hat{\mathbf{b}}_s(\vec{p})\,|\,0> = 0
\end{aligned}} \tag{64}$$

Wenden wir den $\hat{\mathbf{a}}^\dagger$ mehrmals an, so erhalten wir Zustände mit Gesamtviererimpulseigenwerten,

$$\hat{P}_\mu \hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p}) \hat{\mathbf{a}}_r^\dagger(\vec{p}')\,|\,0>= (p_\mu + p'_\mu) \hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p}) \hat{\mathbf{a}}_r^\dagger(\vec{p}')\,|\,0> \tag{65}$$

die genau der Summe der beiden Einzelviererimpulse entsprechen.

Das legt nahe, die Operatoren $\hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p})$ bzw. $\hat{\mathbf{b}}_s^\dagger(\vec{p})$ als Erzeugungsoperatoren von Elektronen bzw. Positronen mit Spinprojektion s und Impuls $\vec{p}$ aufzufassen, genau wie bei der Quantisierung des Klein-Gordon-Feldes. Entsprechend interpretieren wir $\hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p})$ bzw. $\hat{\mathbf{b}}_s(\vec{p})$ wegen

$$\hat{P}_\mu \hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p}) \hat{\mathbf{a}}_r^\dagger(\vec{p}')\,|\,0>= (p'_\mu - p_\mu) \hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p}) \hat{\mathbf{a}}_r^\dagger(\vec{p}')\,|\,0> \tag{66}$$

als Vernichtungsoperatoren genau dieser Teilchen. Wir definieren:

$$\boxed{\begin{aligned}
|\,\mathrm{e}^-(\vec{p}, s)> \; &:= \; \hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p})\,|\,0> \\
|\,\mathrm{e}^+(\vec{p}, s)> \; &:= \; \hat{\mathbf{b}}_s^\dagger(\vec{p})\,|\,0>
\end{aligned}} \tag{67}$$

Der Vakuumzustand $|\,0>$ und die Erzeugungsoperatoren definieren den sogenannten Fock-Raum, mit dem beliebig viele Positronen und Elektronen beschrieben werden könnnen.

5.4 Kommutatoralgebra

Als nächstes müssen wir die Eigenschaften der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren genauer untersuchen. Wir wollen wissen, welcher Kommutatoralgebra sie gehorchen.

Bei der Klein-Gordon-Gleichung führt das Mikrokausalitätsprinzip

$$\begin{aligned}
[\Phi(\vec{x}, t), \Phi(\vec{y}, t)] &= 0 \\
[\Phi(\vec{x}, t), \dot{\Phi}(\vec{y}, t)] &= 0 \qquad \text{für} \quad \vec{x} \neq \vec{y}
\end{aligned} \tag{68}$$

zu der Forderung, dass die Kommutatoralgebra auf Kommutatoren aufbaut.

Man beachte, dass Φ und $\dot{\Phi}$ bei der Klein-Gordon-Gleichung zwei unabhängige Größen darstellen, weil diese von zweiter Ordnung in Ort und Zeit ist. Nun ist die Dirac-Gleichung nur eine Gleichung erster Ordnung. Dafür ist sie komplexwertig, und deswegen können wir ψ und $\bar{\psi} := \psi^\dagger \gamma^0$ als unabhängig annehmen, und fordern:

$$\begin{aligned}
[\psi(\vec{x}, t), \psi(\vec{y}, t)] &= 0 \\
[\psi(\vec{x}, t), \bar{\psi}(\vec{y}, t)] &= 0 \qquad \text{für} \quad \vec{x} \neq \vec{y}
\end{aligned} \tag{69}$$

Das führt aber zu Widersprüchen, wenn wir wie bei der quantisierten Klein-Gordon-Gleichung eine auf Kommutatoren aufbauende Kommutatoralgebra benutzen. Also müssen wir auf die – aufgrund des Fermi-Charakters der Elektronen auch erwarteten – Antikommutatoren zurückgreifen, und fordern der Klein-Gordon-Quantisierung entsprechend:

$$\boxed{\begin{array}{c} \{\hat{*}_s^\dagger(\vec{p}), \hat{\star}_r^\dagger(\vec{p}')\} = \{\hat{*}_s(\vec{p}), \hat{\star}_r(\vec{p}')\} = 0 \\ \left.\begin{array}{l} \{\hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p}), \hat{\mathbf{a}}_r^\dagger(\vec{p}')\} \\ \{\hat{\mathbf{b}}_s(\vec{p}), \hat{\mathbf{b}}_r^\dagger(\vec{p}')\} \end{array}\right\} = (2\pi)^3\, 2p^0\, \delta^3(\vec{p}-\vec{p}')\, \delta_{rs} \\ \{\hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p}), \hat{\mathbf{b}}_r(\vec{p}')\} = \{\hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p}), \hat{\mathbf{b}}_r^\dagger(\vec{p}')\} = 0 \end{array}} \tag{70}$$

Hierbei können für $\hat{*}$ und $\hat{\star}$ beliebig $\hat{\mathbf{a}}$ oder $\hat{\mathbf{b}}$ eingesetzt werden.

Die erste Zeile in (70) entspricht direkt der Vertauschungsforderung

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p})\hat{\mathbf{a}}_r^\dagger(\vec{p}')\,|\,0> &= |\,\mathrm{e}^-(\vec{p},s), \mathrm{e}^-(\vec{p}',r)> \\ &= -|\,\mathrm{e}^-(\vec{p}',r), \mathrm{e}^-(\vec{p},s)> \\ &= -\hat{\mathbf{a}}_r^\dagger(\vec{p}')\hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p})\,|\,0> \end{aligned}$$

und seinen Analogen für Positronen bzw. eine Kombination davon.

Die restlichen Gleichungen entsprechen Orthogonalitätsforderungen:

$$\begin{aligned} <\mathrm{e}^-(\vec{p},s)\,|\,\mathrm{e}^-(\vec{p}',r)> &= <0\,|\,\hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p})\hat{\mathbf{a}}_r^\dagger(\vec{p}')\,|\,0> \\ &= <0\,|\,\{\hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p})\hat{\mathbf{a}}_r^\dagger(\vec{p}')\}\,|\,0> \\ &= (2\pi)^3 2p^0 \delta^3(\vec{p}-\vec{p}')\delta_{rs} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} <\mathrm{e}^+(\vec{p},s)\,|\,\mathrm{e}^-(\vec{p}',r)> &= <0\,|\,\{\hat{\mathbf{b}}_s(\vec{p})\hat{\mathbf{a}}_r^\dagger(\vec{p}')\}\,|\,0> \\ &= 0. \end{aligned}$$

Der Faktor $(2\pi)^3 2p^0$ entspricht genau dem Nenner in der Entwicklung (60).

5.5 Der allgemeine Ein-Elektron-Zustand

Eine Funktion

$$f : \mathbb{R} \times \{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\} \to \mathbb{C}$$

kann über

$$|\,f> = \sum_s \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3\sqrt{2p^0}} f_s(\vec{p})\hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p})\,|\,0> \tag{71}$$

einen allgemeinen Ein-Elektron-Zustand definieren.

Die Normierungsforderung führt zu

$$\begin{aligned} 1 &= <f\,|\,f> \\ &= \sum_{r,s} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\sqrt{p^0 p'^0}} * \\ &\quad * f_s^*(\vec{p}) f_r(\vec{p}')<0\,|\,\hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p})\hat{\mathbf{a}}_r^\dagger(\vec{p}')\,|\,0> \\ &= \sum_{r,s} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\sqrt{p^0 p'^0}} * \\ &\quad * f_s^*(\vec{p}) f_r(\vec{p}')(2\pi)^3 2p^0 \delta_{rs}\delta(\vec{p}-\vec{p}') \\ &= \sum_s \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} |f_s(\vec{p})|^2, \end{aligned} \tag{72}$$

und damit zu einer Forderung für f.

6 Physikalische Operatoren

6.1 Besetzungsdichte

Für die Konstruktion weiterer Operatoren möchten wir zuerst Besetzungsdichteoperatoren $\hat{\mathbf{n}}$ für Elektronen und $\hat{\mathbf{m}}$ für Positronen definieren. Sie sollen die Eigenschaften

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{n}}_r(\vec{p}')\,|\,\mathrm{e}^-(\vec{p},s)> &= (2\pi)^3\delta(\vec{p}-\vec{p}')\delta_{rs}\,|\,\mathrm{e}^-(\vec{p},s)> \\ \hat{\mathbf{m}}_r(\vec{p}')\,|\,\mathrm{e}^+(\vec{p},s)> &= (2\pi)^3\delta(\vec{p}-\vec{p}')\delta_{rs}\,|\,\mathrm{e}^+(\vec{p},s)> \\ \hat{\mathbf{n}}_r(\vec{p}')\,|\,\mathrm{e}^+(\vec{p},s)> &= 0 \\ \hat{\mathbf{m}}_r(\vec{p}')\,|\,\mathrm{e}^-(\vec{p},s)> &= 0 \end{aligned}$$

haben. Wir sehen schnell, dass der jeweilige Vernichtungsvektor ganz ähnliche Eigenschaften hat, jedoch nicht den alten Zustand wieder präpariert. Um dies zu bewerkstelligen, nehmen wir noch einen entsprechenden Erzeugungsperator hinzu und definieren:

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{\mathbf{n}}_s(\vec{p}) &:= \frac{1}{2p^0}\hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p})\hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p}) \\ \hat{\mathbf{m}}_s(\vec{p}) &:= \frac{1}{2p^0}\hat{\mathbf{b}}_s^\dagger(\vec{p})\hat{\mathbf{b}}_s(\vec{p}) \end{aligned}} \tag{73}$$

Angewendet auf einen Ein-Elektron-Zustand (71) erhalten wir

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{n}}_s(\vec{p})\,|\,f> &= \frac{1}{2p^0}\hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p})\hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p})\sum_r\int\frac{d^3p'}{(2\pi)^3\sqrt{2p'^0}}*\\
&\quad * f_r(\vec{p}\,')\hat{\mathbf{a}}_r^\dagger(\vec{p}\,')\,|\,0>\\
&= \frac{1}{2p^0}\hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p})\sum_r\int\frac{d^3p'}{(2\pi)^3\sqrt{2p'^0}}*\\
&\quad * f_r(\vec{p}\,')(2\pi)^3 2p^0\delta_{rs}\delta(\vec{p}-\vec{p}\,')\,|\,0>\\
&= \frac{1}{\sqrt{2p^0}}f_s(\vec{p})\hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p})\,|\,0>
\end{aligned}$$

eine Projektion vom Gesamtzustand $|\,f>$ auf den entsprechenden Impuls und Spin.

6.2 Teilchenzahl

Integrieren wir die Besetzungsdichte über den gesamten Impulsraum, so erhalten wir die Teilchenzahl. Entsprechendes gilt natürlich auch für die Operatoren:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{N}} &:= \sum_s\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\,\hat{\mathbf{n}}_s(\vec{p})\\
\hat{\mathbf{M}} &:= \sum_s\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\,\hat{\mathbf{m}}_s(\vec{p})
\end{aligned}\tag{74}$$

Bei unserem Ein-Elektron-Zustand erhalten wir bei $\hat{\mathbf{N}}$ natürlich den Eigenwert Eins:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{N}}\,|\,f> &= \sum_s\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\hat{\mathbf{n}}_s(\vec{p})\,|\,f>\\
&= \sum_s\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{2p^0}f_s(\vec{p})\hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p})\,|\,0>\\
&= 1\,|\,f>
\end{aligned}$$

Ein allgemeiner Zwei-Elektronen-Zustand hätte natürlich den Eigenwert Zwei, und so weiter.

6.3 Energie-Impuls-Operator – Normalordnung

Der Energie-Impuls-Operator hat die spezifische Eigenschaft, dass Zustände mit scharfer Energie und scharfen Impuls Eigenzustände sind, deren Eigenwert gerade der Energie-Impuls-Vierervektor ist.

Das ist aber gerade bei

$$\hat{P}_\mu := \sum_s\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}p_\mu\left\{\hat{\mathbf{n}}_s(\vec{p})+\hat{\mathbf{m}}_s(\vec{p})\right\}\tag{75}$$

der Fall, wie man leicht nachprüfen kann.

Will man sich den Energie-Impuls-Vektor jedoch kanonisch herleiten, z. B. über die Lagrange-Dichte und den daraus resultierenden Viererimpulsdichtetensor, kommt man zu einem anderen Ergebnis, nämlich:

$$\begin{aligned}
\tilde{\hat{P}}_\mu &= i\int d^3x\,\psi^\dagger(x)\partial_\mu\psi(x)\\
&= \sum_s\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{p_\mu}{2p^0}*\\
&\quad *\left\{\hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p})\hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p})-\hat{\mathbf{b}}_s(\vec{p})\hat{\mathbf{b}}_s^\dagger(\vec{p})\right\}\\
&= \sum_s\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}p_\mu\left\{\hat{\mathbf{n}}_s(\vec{p})+\hat{\mathbf{m}}_s(\vec{p})\right.\\
&\qquad\left.-(2\pi)^3 2p^0\delta^3(0)\right\}
\end{aligned}\tag{76}$$

Wie man unschwer erkennt, divergiert der letzte Term, und damit ist der Ausdruck eigentlich unphysikalisch.

Das Problem liegt in der Reihenfolge der $\hat{\mathbf{b}}$-Operatoren in (76). Das Umordnen derselben bringt uns den divergierenden Term. Wir wollen nun ein Umordnen definieren, bei dem kein divergierender Term auftritt, nämlich mit der Normalordnung:

$$\begin{aligned}
\mathcal{N}(\hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p})\hat{\mathbf{a}}_r^\dagger(\vec{p}\,')) &\equiv\, :(\hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p})\hat{\mathbf{a}}_r^\dagger(\vec{p}\,')):\,\equiv -\hat{\mathbf{a}}_r^\dagger(\vec{p}\,')\hat{\mathbf{a}}_s(\vec{p})\\
\mathcal{N}(\hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p})\hat{\mathbf{a}}_r(\vec{p}\,')) &\equiv\, :(\hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p})\hat{\mathbf{a}}_r(\vec{p}\,')):\,\equiv +\hat{\mathbf{a}}_s^\dagger(\vec{p})\hat{\mathbf{a}}_r(\vec{p}\,')
\end{aligned}\tag{77}$$

Hierbei werden alle Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren so sortiert, dass alle Vernichtungsoperatoren rechts von den Erzeugungsoperatoren stehen, und alle entstehenden divergierenden Terme werden weggestrichen. Damit ergibt sich aus unserem kanonischen Energie-Impuls-Operator nach sogenannter Renormierung

$$\mathcal{N}(\tilde{\hat{P}}_\mu) = \hat{P}_\mu$$

genau der oben geforderte Viererimpulsoperator $\hat{P}_\mu$.