

WS 2012/13
Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und
kondensierten Materie

Dirac-Gleichung

Johannes Kemper, Saskia Schmiemann
(johanneskemper@wwu.de), (saskiaschmiemann@gmail.com)

6. Dezember 2012

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Historische Entwicklung	3
2.1	Schrödingergleichung	3
2.2	Klein-Gordon-Gleichung	3
2.3	Herleitung der Dirac-Gleichung	4
3	Dirac-Gleichung	6
4	Kovariante Formulierung	6
4.1	Aufstellung der kovarianten Dirac-Gleichung	6
4.2	Lorentz-Kovarianz der Dirac-Gleichung	7
5	Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichte	8
6	Lösung der Dirac-Gleichung für ruhendes Teilchen	9
7	Betrachtung der möglichen Energien	10
7.1	positive Energie	10
7.2	negative Energie	11
7.3	Dirac-See	11
8	Drehimpuls/Spin	12
8.1	Spin der vier Lösungen für ruhendes Teilchen	13
9	Nichtrelativistischer Grenzfall	13
10	Outro	14

1 Einleitung

In der nichtrelativistischen Quantenmechanik sind viele Effekte, wie die Spin-Bahn-Kopplung und das gyromagnetische Moment des Elektrons $g_E \approx 2$ nicht beschreibbar. Weiterhin folgt der Spin nicht aus theoretischen Gründen, sondern die Theorie wird aufgrund von experimenteller Evidenz (Stern-Gerlach Versuch) an das reale Verhalten des Elektrons angepasst. Diese Probleme werden durch die relativistische Quantenmechanik und im speziellen durch die Dirac-Theorie gelöst. Diese Arbeit soll einen Überblick über die Entwicklungen in der relativistischen Quantenmechanik zwischen 1926-1928 geben. Im Verlauf der Arbeit wird die Dirac-Gleichung hergeleitet und dargestellt, sowie verschiedene Implikationen der Gleichung genauer erklärt.

2 Historische Entwicklung

2.1 Schrödingergleichung

Historisch hat sich die Quantenmechanik ausgehend von der Schrödingergleichung, welche 1926 von Erwin Schrödinger (siehe Foto) veröffentlicht worden ist, weiter in Richtung relativistische Formulierung entwickelt.



$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \Psi.$$

In der Gleichung fällt auf, dass die Ortsableitung von zweiter Ordnung und die Zeitableitung von erster Ordnung ist, wodurch diese Gleichung unmöglich relativistisch kovariant sein kann.

2.2 Klein-Gordon-Gleichung

Der erste Versuch einer relativistischen Quantentheorie wurde 1926/1927 unternommen, dabei wurde aus der Schrödingergleichung die Klein-Gordon-Gleichung hergeleitet. Ursprünglich hatte schon Schrödinger selbst die Gleichung entwickelt, dieser verwarf die Idee aber, da die Theorie das Wasserstoffspektrum nicht korrekt vorhersagen konnte. Sie wurde schließlich von Oskar Klein (siehe Foto) und Walter Gordon erarbeitet. Man beginnt zur Herleitung der Klein-Gordon-Gleichung mit der Einstein'schen Energie-Impuls Beziehung, dabei sind die $p_\mu = (E/c, -\vec{p})$ bzw $p^\mu = (E/c, \vec{p})$ der kovariante und der kontravariante Viererimpuls:

$$p_\mu p^\mu = \frac{E^2}{c^2} - \vec{p} \cdot \vec{p} = m^2 c^2.$$

Wendet man darauf die Jordan'schen Ersetzungsregeln $\vec{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla$ und $E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ und das Korrespondenzprinzip an, so erhält man direkt die Klein-Gordon-Gleichung:



$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \Phi + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \Phi = 0 \quad \text{bzw.}$$

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi = (-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4) \Psi.$$

Die zweite Form ist zur Anschauung in ähnlicher Form zur Schrödingergleichung gehalten. Es ergeben sich für die Gleichung zwei kritische Probleme. Einmal ist die Wahrscheinlichkeitsdichte nicht zwangsläufig positiv definit, dies sollte eine Wahrscheinlichkeitsdichte aber immer sein:

$$\rho_{KG} = \frac{i\hbar}{2mc^2} (\Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi - \Psi \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*).$$

Und zweitens ist die Energie nicht auf positive Werte beschränkt. Denn es gilt:

$$E = \pm \sqrt{m^2 c^4 + \mathbf{p}^2 c^2}.$$

Die auftretenden Probleme bei Zuständen mit negativer Energie lassen sich nicht wie in der Dirac-Theorie durch eine Art Dirac-See (später mehr dazu) lösen, da die Klein-Gordon-Gleichung das Verhalten von Spin 0 Teilchen beschreibt, für welche das Pauli-Prinzip nicht gilt. Daraus folgt, dass ein einmal in einen niedrigeren Zustand wechselndes Teilchen (unter Abgabe von $E = h\nu$) endlos weiter „fallen“ würde und so ein unendlicher Energieausstoß auftreten würde. Wegen dieser Probleme wird die Gleichung in der Quantenfeldtheorie in ein Klein-Gordon-Feld umgewandelt, dieses gilt für die Beschreibung von massiven Spin 0 Teilchen (z.B. Pionen), weiterhin wird ρ_{KG} dabei als Ladungsdichte uminterpretiert.

2.3 Herleitung der Dirac-Gleichung

Der Durchbruch in der relativistischen Quantenmechanik gelang Paul Dirac 1928. Dieser bekam dafür im Jahr 1933 zusammen mit Erwin Schrödinger den Nobelpreis für Physik. Um seine Theorie auf zu stellen, werden die folgenden Forderungen an die noch unbekannte Gleichung gestellt:

- Die Gleichung muss linear und homogen in der Wellenfunktion $\Psi(\vec{r}, t)$ sein.
- Die Gleichung enthält nur Zeit- und Raumableitungen erster Ordnungen.
- Die Hermitezität des Hamiltonoperators muss gelten.
- Das Korrespondenzprinzip muss erfüllt sein.
- Die Bewegungsgleichung ist die einfachst mögliche, die alle vorherigen Forderungen erfüllt.

Die fünfte Forderung nimmt die zweite Forderung vorweg, trotzdem ist diese Forderung aufgrund ihrer Wichtigkeit hier nochmal explizit aufgeführt. Man macht nun einen einfachen linearen Ansatz der alle Forderungen erfüllt, außerdem wird die Summenkonvention über $l = 1, 2, 3$ benutzt.

$$i\partial_t \Psi = i a \Psi + i a_l \partial_l \Psi, \quad \text{mit } a, a_l \in \mathbb{C}, \quad (1)$$

$$\Psi = A(\vec{r}, t) \cdot e^{\frac{iS(\vec{r}, t)}{\hbar}}, \quad \text{mit } S \in \mathbb{R}. \quad (2)$$

Einsetzen von (2) in (1) ergibt:

$$[i\partial_t A - \frac{1}{\hbar} A \partial_t S] = i a A + i a_l [\partial_l A + \frac{i}{\hbar} A \partial_l S]$$

Man kann nun für die eckigen Klammern im quasiklassischer Grenzfall die folgende Abschätzung machen. Dabei geht ein, dass ein Wellenpaket, welches ein Teilchen repräsentiert, im Grenzfall auf eine kleine Umgebung des klassischen Teilchenorts konzentriert ist.

$$\frac{|i\partial_t A|}{|-\frac{A}{\hbar} \partial_t S|} \approx \frac{\hbar}{E \Delta t} \quad \text{mit } (\partial_t S = -E \text{ und } |\partial_t A| = \frac{A}{\Delta t}).$$

Hierbei ist $\Delta t \approx d/v$ die Zeit, die das Wellenpaket braucht um ein Gebiet der Ausdehnung d zu durchlaufen. Für die rechte, eckige Klammer gilt analog:

$$\frac{|\partial_l A|}{|\frac{i}{\hbar} A \partial_l S|} \approx \frac{\hbar}{|p_l| d}.$$

Die Quantenmechanik sollte für hohe Energien und Impulse in die klassische Mechanik übergehen, daraus folgt: $E \Delta t \gg \hbar$ und $|p_l| d \gg \hbar$. Aufgrund der Abschätzungen können wir außerdem $i \partial_t A$ und $i a_l \partial_l A$ vernachlässigen, daraus folgt die folgende Gleichung:

$$-\partial_t S = i \hbar a - a_l \partial_l S.$$

Quadriert man diese Gleichung so ergibt sich:

$$(\partial_t S)^2 = -\hbar^2 a^2 - i \hbar (a a_l + a_l a) \partial_l S + \frac{1}{2} (a_l a_m + a_m a_l) \partial_l S \partial_m S.$$

Diese Gleichung lässt sich nun mit der (quadrierten) klassischen Hamilton-Jacobi-Gleichung ohne äußere Kräfte:

$$(\partial_t S)^2 = m_0^2 c^4 + c^2 (\partial_x S)^2$$

vergleichen, daraus folgt für die Koeffizienten a und a_l im kräftefreien Fall:

$$a^2 = - \left(\frac{m_0 c^2}{\hbar} \right)^2, \quad a a_l + a_l a = 0, \quad a_l a_m + a_m a_l = 2 \delta_{lm} c^2$$

Eine wichtige Forderung aus diesen Relationen ist, dass Ψ mehrkomponentig sein muss. Dies folgt daraus, dass die Koeffizienten mehrkomponentige Matrizen sein müssen, um diese Relationen erfüllen zu können. Fordert man weiter, dass der Dirac'sche Hamilton-Operator $H_D = i a + i a_l \partial_l$ hermitesch sein muss, so lässt sich daraus folgern, dass $a^\dagger = -a$ antihermitesch ist und $a_l^\dagger = a_l$ hermitesch sein muss. Man definiert nun a und a_l als:

$$a = \frac{m_0 c^2}{i \hbar} \beta, \quad a_l = -c \alpha_l.$$

Hierbei sind β und α_l mit $l = 1, 2, 3$ Matrizen deren genaue Form sich aus den folgenden Regeln ergeben:

$$[\alpha_l, \alpha_m] = 2 \delta_{l,m} \quad \text{und} \quad [\beta, \alpha_l]_+ = \beta, \alpha_l = 0.$$

Zusammen mit $\alpha_x^2 = \alpha_y^2 = \alpha_z^2 = \beta^2 = 1$ erzeugen die Matrizen also eine Clifford-Algebra. Ohne genaue Herleitung gilt für hermitesche Matrizen, dass sie durch eine unitäre Transformation auf Diagonalf orm gebracht werden können und aus der Clifford-Algebra folgt, dass deren Quadrate 1 sein müssen. Daraus und aus den anderen Regeln der Clifford-Algebra folgt:

$$\text{Spur}(\alpha_l) = \text{Spur}(\beta) = 0, \quad \text{Eigenwerte: } \lambda = \pm 1.$$

Hieraus und aus der Algebra folgt, dass man fünf linear unabhängige Matrizen gerader Dimension benötigt um diese Relationen zu erfüllen. Für 2×2 Matrizen gibt es nur maximal vier linear unabhängige Matrizen, daraus folgt also zwingend, dass es sich um $n \times n$ -Matrizen mit n gerade und größer gleich 4 handeln muss. Aus der Forderung, dass die Gleichung möglichst einfach sein muss, folgt dann direkt, dass es sich bei β und den drei α_l 's um 4×4 Matrizen handeln muss.

3 Dirac-Gleichung

Setzt man nun die in der Herleitung berechneten Gleichungen und Koeffizienten in eine Gleichung zusammen, so ergibt sich die Dirac-Gleichung:



$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left(m_0 c^2 \beta + \frac{c\hbar}{i} \sum_{k=1}^3 \alpha_k \partial_k \right) \Psi.$$

Wie zuvor beschrieben sind β und α_k 4x4 Matrizen, diese sehen in der Standard-Form wie folgt aus:

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \alpha_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}.$$

Dies ist nur eine mögliche Darstellungsform, so gibt es zum Beispiel auch die Weyl-Darstellung, die Majorana-Darstellung und die chirale Darstellung. Die vierkomponentigen Ψ -Wellenfunktionen werden Dirac-Spinoren genannt, sie sind vierkomponentig und transformieren sich unter Drehung so, dass erst eine Drehung um 4π sie auf die Identität abbildet. Weiterhin ist die Dirac-Gleichung $SU(2)$ invariant und besitzt aufgrund der 4-dimensionalen Spinoren mehr Freiheitsgrade als nichtrelativistische Quantentheorien. Die zusätzlichen Freiheitsgrade versetzen die Dirac-Gleichung in die Lage den Spin korrekt beschreiben zu können.

4 Kovariante Formulierung

4.1 Aufstellung der kovarianten Dirac-Gleichung

Die Dirac-Gleichung wird, um an die kovariante Darstellung zu kommen, mit β/c multipliziert, daraus ergibt sich:

$$i\hbar(\beta \partial_0 \Psi + \beta \vec{\alpha} \cdot \nabla \Psi) - mc\Psi = 0.$$

Definiert man sich nun den Vierer-Matrix-Vektor γ^μ wie folgt:

$$\gamma^0 = \beta, \gamma^k = \beta \alpha_k \quad \text{für} \quad k = 1, 2, 3,$$

so ergeben sich die γ -Matrizen zu:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \gamma_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ -\sigma_k & 0 \end{pmatrix}.$$

Die γ -Matrizen erzeugen, wie die $\vec{\alpha}$ - und β -Matrizen eine Clifford-Algebra, mit den dazu gehörigen Relationen, wie z.B.:

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} \mathbb{1}.$$

Außerdem ergibt sich, dass $\gamma^0 = \gamma^{0\dagger}$ hermitesch und $\gamma^k = -\gamma^{k\dagger}$ antihermitesch ist. Insgesamt ergibt sich so die kovariante Form der Dirac-Gleichung in Feynman-Notation:

$$\boxed{(\not{p} - mc)\Psi = 0}, \quad \text{mit} \quad \not{p} = \gamma^\mu i\hbar \partial_\mu = \gamma^\mu p_\mu.$$

Dabei geht Definition der partiellen Viererableitung $\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = (\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \nabla)$ ein, den Index kann man, wie aus der speziellen Relativitätstheorie bekannt, mit dem metrischen Tensor hoch und runter ziehen. Die kovariante Form der im nächsten Kapitel beschriebenen Kontinuitätsgleichung ist durch $\partial_\mu j^\mu = \partial_\mu \Psi^\dagger \gamma^\mu \Psi$ gegeben.

4.2 Lorentz-Kovarianz der Dirac-Gleichung

Man betrachte zwei Inertialsysteme I mit x und Ψ , sowie I' mit x' und Ψ' . Diese sind durch eine Poincare-Transformation verbunden, die wie folgt definiert ist:

$$x' = \Lambda x \quad \text{und} \quad \Psi'(x') = S(\Lambda)\Psi(x) = S(\Lambda)\Psi(\Lambda^{-1}(x')).$$

Man kann nun das $S(\Lambda)$ als eine 4x4-Matrix identifizieren, die auf den Dirac-Spinor wirken muss:

$$\Psi'_\alpha(x') = \sum_{\beta=1}^4 S_{\alpha\beta}(\Lambda)\Psi_\beta(\Lambda^{-1}(x'))$$

Für die Kovarianz der Dirac-Gleichung muss gelten, dass:

$$(\not{p}' - m)\Psi'(x') = 0, \quad \text{mit} \quad \not{p}' = \gamma^\mu i\hbar \frac{\partial}{\partial x'^\mu} \quad (3)$$

ist, wobei $c = 1$ gesetzt wurde. Ausgangspunkt unserer Bemühungen ist die Dirac-Gleichung im Inertialsystem I :

$$(i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - m)\Psi = 0.$$

Diese kann mit Hilfe der Transformationsregeln:

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x'^\nu} = \Lambda_\mu^\nu \frac{\partial}{\partial x'^\nu} \quad \text{und} \quad S^{-1}\Psi'(x') = \Psi(x),$$

umgeformt werden und es ergibt sich:

$$(i\gamma^\mu \Lambda_\mu^\nu \partial'_\nu - m)S^{-1}(\Lambda)\Psi'(x') = 0.$$

Multipliziert man diese Gleichung von links mit S , dann ergibt sich:

$$i\hbar S(\Lambda)\Lambda_\mu^\nu \gamma^\mu S(\Lambda)^{-1} \partial'_\nu \Psi'(x') - m\Psi'(x') = 0.$$

Daraus ergibt sich durch Vergleich mit Gleichung (3) die folgende Bestimmungsgleichung für $S(\Lambda)$:

$$S(\Lambda)^{-1} \gamma^\nu S(\Lambda) = \Lambda_\mu^\nu \gamma^\mu.$$

Diese Gleichung kann gelöst werden (was hier zu weit führen würde), und die Lösung lautet für infinitesimale Lorentz-Transformationen:

$$S(\Lambda) = \mathbb{1} - \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \Delta w^{\mu\nu}.$$

Dabei sind $\Delta w^{\mu\nu}$ die Parameter einer infinitesimalen Lorentz-Transformation, und $\sigma_{\mu\nu}$ ist gegeben durch:

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma_\mu, \gamma_\nu] = \begin{cases} 0 & , \text{für } \mu = \nu \\ -i\alpha_i & , \text{für } \mu = 0, \nu = i \\ \epsilon_{ijk} \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & \sigma_k \end{pmatrix} & , \text{für } \mu = i, \nu = j \end{cases}$$

5 Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichte

Eines der größten Probleme der Klein-Gordon-Gleichung ist, dass die Dichte nicht positiv definit ist und somit nicht als Wahrscheinlichkeitsdichte angesehen werden kann. Die Dichte der Dirac-Gleichung berechnet sich aus dem Skalarprodukt der adjungierten Wellenfunktion und der nicht adjungierten Wellenfunktion. Wobei sich die adjungierte Wellenfunktion aus den komplex konjugierten Komponenten der Wellenfunktion ergibt

$$\Psi^+ = (\Psi_1^*, \Psi_2^*, \Psi_3^*, \Psi_4^*).$$

Somit ergibt sich eine Dichte von

$$\rho = \Psi^+ \Psi = \Psi_1^* \Psi_1 + \Psi_2^* \Psi_2 + \Psi_3^* \Psi_3 + \Psi_4^* \Psi_4.$$

Da hier immer die einzelnen Komponenten der komplex konjugierten Wellenfunktion mit denen der Wellenfunktion multipliziert werden, addieren sich die Beträge der Wellenfunktion auf. Hieraus folgt, dass die Dichte positiv definit ist und somit als Wahrscheinlichkeitsdichte angesehen werden kann. Aus der Dirac-Gleichung (3) ergibt sich die konjugierte Dirac-Gleichung

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^+ = -\frac{\hbar}{i} c (\nabla \Psi^+) \cdot \vec{\alpha} + mc^2 \Psi^+ \beta. \quad (4)$$

Stellt man nun die beiden Gleichungen (3) und (4) nach den Zeitableitungen der Wellenfunktionen um

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi = -c \vec{\alpha} \nabla \Psi + \frac{\beta}{i\hbar} mc^2 \Psi \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi^+ = -c (\nabla \Psi^+) \vec{\alpha} - \frac{mc^2}{i\hbar} \Psi^+ \beta, \quad (6)$$

so kann man diese zur Berechnung der zeitlichen Ableitung der Dichte nutzen. Durch die Produktregel und einsetzen der beiden Gleichungen ergibt sich somit

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^+ \Psi) &= -c (\nabla \Psi) \vec{\alpha} \Psi - \frac{mc^2}{i\hbar} \Psi^+ \beta \Psi - \Psi^+ c \vec{\alpha} \nabla \Psi + \Psi^+ \frac{\beta}{i\hbar} mc^2 \Psi \\ &= c [(\nabla \Psi^+) \vec{\alpha} \Psi + \Psi^+ \vec{\alpha} \nabla \Psi] - \Psi^+ \frac{mc^2 \beta}{i\hbar} \Psi + \Psi^+ \frac{\beta mc^2}{i\hbar} \Psi \\ &= -c [\nabla (\Psi^+ \vec{\alpha} \Psi)] \end{aligned}$$

Hieraus lässt sich eine Stromdichte definieren:

$$j^k = c \Psi^+ \alpha^k \Psi.$$

Wird nun die Kontinuitätsgleichung betrachtet

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \vec{j} = 0$$

kann diese umformuliert werden in die kovariante Schreibweise und vereinfacht sich zu

$$\partial_\mu j^\mu = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} j^0 + \frac{\partial}{\partial x^k} j^k = 0,$$

wobei

$$j^0 = c\rho \rightarrow j^\mu \equiv (j^0, j^k)$$

ist.

6 Lösung der Dirac-Gleichung für ruhendes Teilchen

Zum Lösen der Dirac-Gleichung betrachtet man eine ebene Welle:

$$\Psi(\vec{r}, t) = u e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} = u e^{-ikx},$$

wobei u als Vierer-Vektor gesetzt sein soll:

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}.$$

Bei der Betrachtung der Gleichung

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)u = 0, \quad (7)$$

stellt man fest, dass für die Lösbarkeit der Gleichung

$$p_\mu p^\mu = m^2 c^2$$

gelten muss. Da ein ruhendes Teilchen betrachtet wird, gilt $p_i = 0$ mit $i = 1, 2, 3$, woraus folgt, dass $E^2 = m^2 c^4$. Setzt man diese Erkenntnisse in die Gleichung (7) ein, so ergibt sich

$$\Rightarrow (\gamma^0 p_0 - mc^2)u = \left(\begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} p_0 - mc \right) \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = 0.$$

Dieses sind vier verschiedene Gleichungen, die im Folgenden betrachtet werden. Aus den ersten beiden Gleichungen ergibt sich

$$(E - mc^2)u_1 = 0 \rightarrow E = mc^2 \quad (E - mc^2)u_2 = 0 \rightarrow E = mc^2$$

für die sich die folgenden beiden möglichen Lösungen ergeben

$$u = u^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u = u^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Es ist anzumerken, dass bei diesen beiden Gleichungen die Energie positiv ist. Betrachtet man nun die anderen beiden Gleichungen

$$(-E - mc^2)u_3 = 0 \rightarrow E = -mc^2 \quad (-E - mc^2)u_4 = 0 \rightarrow E = -mc^2,$$

so tauchen hier wieder negative Energien auf, welche schon an der Klein-Gordon-Gleichung gestört haben. Hierzu hat Dirac allerdings eine Lösung gefunden, die die negativen Energien erklärt, dieses wird im Kapitel „Dirac-See“ erklärt. Aus den betrachteten Gleichungen ergeben sich dann zwei weitere mögliche Lösungen für die Dirac-Gleichung

$$u = u^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u = u^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

7 Betrachtung der möglichen Energien

Um die möglichen Energien zu betrachten, wird die Wellenfunktion umformuliert zu

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad \varphi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}, \quad \chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}.$$

Setzt man diese neue Schreibweise der Wellenfunktion in die Dirac-Gleichung ein, so erhält man

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc) \Psi = \begin{pmatrix} (p_0 - mc)\varphi - \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \chi \\ (-p_0 - mc)\chi + \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \varphi \end{pmatrix} = 0.$$

Stellt man die zweite Gleichung nach χ um

$$\chi = \frac{\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{p_0 + mc} \varphi,$$

so haben wir ein Verhältnis von χ in Abhängigkeit von φ . Multipliziert man beide Seiten der Gleichung mit $\frac{\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{p_0 - mc}$

$$\Leftrightarrow \frac{\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{p_0 - mc} \chi = \frac{(\vec{p} \cdot \vec{\sigma})(\vec{p} \cdot \vec{\sigma})}{(p_0 + mc)(p_0 - mc)} \varphi,$$

mit Berechnung des Zählers:

$$(\vec{p} \cdot \vec{\sigma})(\vec{p} \cdot \vec{\sigma}) = \vec{p}^2 + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} \times \vec{p}) = \vec{p}^2$$

und den folgenden Annahmen:

$$E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \quad \vec{p}^2 = \frac{E^2}{c^2} - m^2 c^2 \quad \Rightarrow \vec{p}^2 = p_0^2 - m^2 c^2,$$

so ergibt sich

$$\frac{\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{p_0 - mc} \chi = \frac{\vec{p}^2}{p_0^2 - m^2 c^2} \varphi = \varphi$$

für das Verhältnis von φ zu χ . Setzt man dieses Ergebnis in die erste Gleichung von (7) so ist die Gleichung erfüllt und das Ergebnis für die Abhängigkeiten der beiden Teile der Wellenfunktion ist überprüft.

7.1 positive Energie

Setzen wir bei den Gleichungen der positiven Energie für $\varphi^{(1)}$ und $\varphi^{(2)}$ zwei linear unabhängige Lösungen ein, so erhält man

$$\varphi^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \chi^{(1)} = \frac{\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{p_0 + mc} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{p_3 c}{E + mc^2} \\ \frac{(p_1 + ip_2)c}{E + mc^2} \end{pmatrix}$$

$$\varphi^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \chi^{(2)} = \frac{\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{p_0 + mc} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{(p_1 - ip_2)c}{E + mc^2} \\ \frac{-p_3 c}{E + mc^2} \end{pmatrix}.$$

Für den nicht relativistischen Grenzfall, dass für die Energie $E \approx mc^2$ gilt, folgt $\chi \ll \varphi$ wodurch φ als die „große Komponente“ und χ als die „kleine Komponente“ bezeichnet wird.

7.2 negative Energie

Dieses gilt analog für die negativen Energien:

$$\chi^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \varphi^{(1)} = \frac{\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{-p_0 + mc} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{p_3 c}{|E| + mc^2} \\ \frac{(p_1 + ip_2)c}{|E| + mc^2} \end{pmatrix}$$

$$\chi^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \varphi^{(2)} = \frac{\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{p_0 + mc} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{(p_1 - ip_2)c}{|E| + mc^2} \\ \frac{-p_3 c}{|E| + mc^2} \end{pmatrix}.$$

Für den nicht relativistischen Grenzfall $E \approx mc^2$ gilt hier, dass $\varphi \ll \chi$ daher ist nun χ die „große Komponente“ und φ die „kleine Komponente“.

7.3 Dirac-See

Die Dirac-Gleichung dient der Beschreibung von Elektronen. Diese gehören zu den Fermionen und gehorchen dem Pauliprinzip. Damit die Elektronen nicht in immer tiefere Zustände fallen, postulierte Dirac, dass in dem Vakuum alle negativen Energiezustände von Elektronen besetzt sind. Somit kann bei Hinzufügen eines Elektrons dieses nicht mehr in den Zustand negativer Energie übergehen, da laut dem Pauli-Prinzip jeder Zustand nur einfach besetzt werden kann. Die besetzten negativen Zustände nennt man den Dirac-See. Durch hinreichende Anregung kann jedoch ein Elektron aus dem Dirac-See herausgelöst werden. Dadurch bleibt in dem Dirac-See der Zustand als Loch zurück. Das freie Elektron geht in den Zustand positiver Energie über, siehe hierzu die Abbildung 1. Dem Loch wird als Eigenschaften zugeschrieben, dass dieses sich wie ein Teilchen mit positiver Energie und positiver Ladung verhält. Später entdeckte Weyl, dass die Löcher die gleiche Masse besitzen wie ein Elektron. 1932 entdeckte Anderson, dass es sich um Positronen, die Antiteilchen des Elektrons handelt. Das in Abbildung 1 herausgelöste Elektron kann durch Abgabe von Energie wieder zurück in

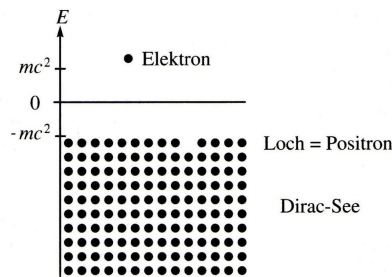


Abbildung 1: Ein Elektron ist durch zuführen von hinreichender Energie in den Zustand positiver Energie übergegangen und hat im Dirac-See ein Loch hinterlassen.

den Zustand negativer Energie zurückfallen. Durch das Zurückfallen werden Elektron und Positron vernichtet, dieser Prozess ist bekannt als die Paarvernichtung. Verläuft der Prozess andersrum, so spricht man von Paarerzeugung. Später werden im Rahmen der relativistischen Quantenfeldtheorie die Elektronen und Positronen als gleichberechtigt angesehen.

8 Drehimpuls/Spin

Betrachtet man den Bahndrehimpuls

$$\vec{L} = \vec{Q} \times \vec{P}$$

und berechnet dessen Kommutator mit dem Hamiltonoperator der Dirac-Gleichung, so erkennt man, dass

$$\begin{aligned} [L_i, H] &= [\epsilon_{ijk} q_j p_k, c\alpha_l p_l] = \epsilon_{ijk} c\alpha_l [q_j, p_l] p_k \\ &= \epsilon_{ijk} c\alpha_l i\hbar \delta_{jl} p_k = i\hbar c \epsilon_{ijk} \alpha_j p_k \\ &= i\hbar c (\vec{\alpha} \times \vec{p})_i \neq 0 \end{aligned}$$

der Bahndrehimpuls in dieser Theorie nicht erhalten ist. Daher wird der Spin definiert. Der Spinoperator kann definiert werden als

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma},$$

wobei

$$\vec{\Sigma} := \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}$$

ist. Die Vertauschungsregeln des Spins sind analog zu denen des Bahndrehimpulses

$$[S_j, S_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} S_l.$$

Aus der Berechnung des Eigenwertes

$$\vec{S}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \mathbb{1} = s(s+1)\hbar \Rightarrow s = \frac{1}{2},$$

lässt sich erkennen, dass der Spin 1/2 beschrieben wird. Wird nun die Berechnung des Kommutators mit dem Spin und dem Hamiltonoperator berechnet

$$[\Sigma_i, H] = [\Sigma_i, c\alpha_l p_l] = c[\Sigma_i, \alpha_l] p_l \quad \text{mit} \quad [\Sigma_i, \alpha_l] = 2i\epsilon_{ilk} \alpha_k$$

$$[\Sigma_i, H] = 2ic\epsilon_{ilk} \alpha_k p_l = -2ic[\vec{\alpha} \times \vec{p}]_i = -\frac{2}{\hbar} [L_i, H],$$

so ist zu erkennen, dass sich ein Vielfaches des Kommutators von Drehimpuls und Hamiltonoperator ergibt. Somit kann man einen Gesamtdrehimpuls definieren als:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} = \vec{L} + \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma}.$$

Wird nun der Kommutator von dem Gesamtdrehimpuls und dem Hamiltonoperator berechnet

$$[\vec{J}, H]_i = [\epsilon_{ijk} q_j p_k + \frac{\hbar}{2} \Sigma_i, c\alpha_l p_l] = [L_i, H] + \frac{\hbar}{2} [\Sigma_i, H] = 0,$$

so sieht man, dass der Gesamtdrehimpuls erhalten ist.

8.1 Spin der vier Lösungen für ruhendes Teilchen

Wird die dritte Komponente des Spinoperators auf die zuvor ermittelten Lösungen für ein ruhendes Teilchen angewendet, so ergibt sich:

$$S_3 u^{(1)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} u^{(1)}.$$

Analog gilt dieses ebenfalls für die anderen drei möglichen Lösungen:

$$\begin{aligned} S_3 u^{(1)} &= \frac{\hbar}{2} u^{(1)} & S_3 u^{(2)} &= -\frac{\hbar}{2} u^{(2)} \\ S_3 u^{(3)} &= \frac{\hbar}{2} u^{(3)} & S_3 u^{(4)} &= -\frac{\hbar}{2} u^{(4)}. \end{aligned}$$

Aus den Ergebnissen ist am Vorzeichen abzulesen, dass $u^{(1)}$ und $u^{(3)}$ einen Spin up beschreiben und die Bewegungsgleichungen $u^{(2)}$ und $u^{(4)}$ einen Spin down beschreiben.

9 Nichtrelativistischer Grenzfall

Zuerst wird die Dirac-Gleichung mit äußeren Feldern $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left[c\vec{\alpha} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) + \beta mc^2 + q\Phi \right] \Psi$ in zwei Teilgleichungen zerlegt, diese werden Weyl-Gleichungen genannt:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\varphi} &= c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \tilde{\chi} + q\Phi \tilde{\varphi} + mc^2 \tilde{\varphi}, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\chi} &= c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \tilde{\varphi} + q\Phi \tilde{\chi} - mc^2 \tilde{\chi}, \end{aligned}$$

wobei der kinetischen Impuls als $\vec{\pi} = \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}$ eingeführt wurde. Bei dieser Umformung wurden einmal der Vierer-Spinor in $\Psi \equiv \begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix}$ und außerdem die Dirac-Matrizen in die Pauli-Matrizen zerlegt. Die Ruheenergie ist im nichtrelativistischen Grenzfall der größte Anteil, deshalb vereinfacht man zur Auffindung der Lösungen mit positiver Energie wie folgt:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} = e^{-\frac{imc^2}{\hbar} t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}.$$

Daraus ergeben sich für langsame Variationen von $\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ die Gleichungen:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi &= c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \chi + q\Phi \varphi + mc^2 \varphi, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi &= c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \varphi + q\Phi \chi - mc^2 \chi, \end{aligned} \tag{8}$$

Vernachlässigt man in der zweiten Gleichung $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi$ und $q\Phi \chi$ gegenüber $2mc^2 \chi$, so ergibt sich:

$$\chi = \frac{c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}}{2mc^2} \varphi.$$

Einsetzen in (8) ergibt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi = \left(\frac{1}{2m} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}) + q\Phi \right) \varphi.$$

Für die σ_i gilt folgende Beziehung: $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk} \sigma_k$, daraus folgert man direkt:

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}) = \vec{\pi}^2 + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{\pi} \times \vec{\pi}).$$

Für das Kreuzprodukt ergibt sich:

$$(\vec{\pi} \times \vec{\pi})_i \varphi = \frac{ie\hbar}{c} \epsilon_{ijk} (\partial_j A_k - A_k \partial_j) \varphi = \frac{iq\hbar}{c} (\epsilon_{ijk} \partial_j A_k) \varphi = \frac{iq\hbar}{c} B_i \varphi.$$

Diese Umformung ist für einige Leser vielleicht besser in der folgenden Form (ohne Vektorpfeile und Konstanten) nachvollziehbar:

$$\nabla \times \vec{A} + \vec{A} \times \nabla = \nabla \times \vec{A} - \nabla \times \vec{A} = (\nabla \times \vec{A}) = \vec{B}.$$

Einfaches Einsetzen der Relation ergibt:

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}) = \vec{\pi}^2 - \frac{q\hbar}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}.$$

Daraus folgt schlussendlich die (bekannte) Pauli-Gleichung mit $q = e$ für Elektronen:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi = \left[\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + e\Phi \right] \varphi.$$

Hieraus lässt sich der gyromagnetische Faktor des Elektrons $g_E = 2$ ablesen.

10 Outro

Kurz zusammen gefasst ergibt sich, dass es uns gelungen ist aus einem einfachen linearen Ansatz die relativistische Quantenmechanik in Form der Dirac-Gleichung, hier in kovarianter Form $(\not{p} - mc)\Psi = 0$, herzuleiten. Aus der Gleichung folgen viele Erkenntnisse von großer Bedeutung, wie zum Beispiel, dass der Spin natürlich aus der Dirac-Theorie folgt und somit als Produkt der relativistischen Quantenmechanik angesehen werden kann. Weiterhin folgen aus der Theorie die Antiteilchen, welche Carl Anderson am 2. August 1932 experimentell in der kosmischen Strahlung als Positronen nachwies. Als Ausblick, warum die Dirac-Theorie nicht das Ende der Suche nach der vollständigen Theorie sein kann, ist zum Beispiel das Klein-Paradoxon zu nennen. Als Klein mit der Dirac-Gleichung das bekannte Problem der Elektronenstreuung an einer Potentialbarriere untersuchte, bekam er folgendes Ergebnis. Ist das Potential in der Größenordnung der Masse des Elektrons $V \propto mc^2$, so ist die Barriere nahezu transparent. Weiterhin verringert sich die Reflexion und das Elektron wird immer transmittiert, falls das Potential gegen unendlich geht. Aufgrund der empirischen Evidenz ist dieses Verhalten aber so nicht zu beweisen und dies folgt so auch nicht aus der nichtrelativistischen Quantenmechanik.

Literatur

- [1] Quantum Mechanics, Second Edition, Leonard I. Schiff, McGRAW-HILL BOOK COMPANY, INC. 1955
- [2] Quantenmechanik für Fortgeschrittene, 2. Auflage, Franz Schwabl, Springer-Verlag, 2000
- [3] Quantentheorie, 2. Auflage, Gernot Münster, Walter de Gruyter GmbH & Co. KG, 2010
- [4] Quantum Field Theory, Second Edition, Lewis H. Ryder, Cambridge University Press, 1996
- [5] Theoretische Physik: Relativistische Quantenmechanik, Quantenfeldtheorie und Elementarteilchentheorie, Eckhard Rebhahn, Springer-Verlag, 2010