

Relativistische Quanten-
mechanik

Sommersemester 2010

Georg Holschuh

Institut für Theoretische Physik

Univ. Heidelberg

Relativistische Quantenmechanik

Georg Wolschyn

	<u>Seite</u>
1) Einleitung	1
2) Verbindung zur nichtrelativistischen QM	10
3) Klein-Paradoxon-Gleichung	15
4) Dirac-Gleichung	38
5) Invarianzen der Dirac-Gleichung	57
6) Lösung der Dirac-Gleichung mit Zentralpotential	71
7) Das Kleinsche Paradoxon	85
8) Dirac-Neutrinos: Die Weyl-Gleichung	93
9) Grundzüge der Quantenelektrodynamik	102
10) Elemente der relativistischen Streutheorie	120

Literatur

- J.D. Bjorken, S.D. Drell : Relativistische Quantenmechanik
A. Messiah, Quantenmechanik, Band II, de Gruyter 1990
H. M. Pillehuku, Relativistic Quantum Mechanics
Springer 2003 / 2nd ed. 2005
A. Wache, Relativistische Quantenmechanik,
Springer 2005
C. Itzykson, J.-B. Zuber, Quantum Field Theory,
Mc Graw-Hill, NY 1980
O. Nachtmann, Elementarteilchenphysik, Vieweg,
Braunschweig, 1986
W. Preiser, Relativistic Quantum Mechanics,
Springer, 1991
F. Schwabl, Quantenmechanik für Fortgeschrittene,
Springer, Heidelberg, 1997

Relativistische Quantenmechanik

Heidelberg, Sommersemester 2009

1. Einleitung

Nichtrelativistische QM:

beruht auf der Schrödinger-Gleichung (SE):

Ableitung via Korrespondenzprinzip aus dem Hamilton-Formalismus der klass. Mechanik.

- Die SE ist Galilei-invariant (wie die Hamilton-Fkt)
- gültig nur für $v \ll c$

Relativistische QM

- $v \lesssim c$
 - WW von Licht und Materie
 - $E_{WW} \gtrsim mc^2 \Rightarrow$ Teilchenzeugung
- erfordern Feldquantisierung \Rightarrow "Quantenfeldtheorie"
- } Lorentz-Invariante Theorie

Relativistische Wellengleichungen

beschreiben Teilchen in einem vorgegebenen Kraftfeld - insbes. dem elektromagnetischen Feld -, das zunächst noch nicht quantisiert wird.

Die Wellengleichung soll dem Korrespondenzprinzip genügen, und für Teilchen mit Spin in nichtrelativistischer Näherung die Pauli-Gleichung ergeben.

Histwischel was die erste relativistische Wellengleichung die "klein-Pauli-Gleichung" (KGE)

E. Schrödinger, Annalen Phys. 81, 109 (1926)

W. Pauli, Z. Physik 40, 117 (1926)

O. Klein, Z. Physik 41, 407 (1927).

Sie beschreibt Mesonen mit Spin 0, z.B. Pionen. Wegen negativer Wahrscheinlichkeitsdichten (s. Kap. 3!) wurde sie zunächst verworfen und erst später als Grundlage von Feldtheorien für skalare Mesonfelder etabliert.

Erst die von Paul Dirac aufgestellte Gleichung beschreibt Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ (Fermionen, spez. der Elektronen):

P.A.M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A117, 610 (1928). (DE)

Wie die KGE hat die DE Lösungen mit negativem Energie.

Dirac hat deshalb 1930 postuliert, dass diese Zustände alle besetzt sind, so dass für Fermionen (Pauli-Prinzip!) keine Übergänge möglich sind.

"Löcher" in diesem "Dirac-See" entsprechen Antiteilchen mit entgegengesetzter Ladung:

P.A.M. Dirac, "A theory of electrons and protons", Proc. Roy. Soc. A126, 360 (1930):

[zunächst hielt man das Proton für das Antiteilchen der Elektronen]

Dirac versuchte zunächst, die Massendifferenz e/p auf die Wechselwirkung mit dem See zurückzuführen.

H. Weyl zeigte jedoch, dass die Dirac-Gleichung vollständig symmetrisch für neg./pos. Ladungen ist; Dirac modifizierte daraufhin seine Theorie und postulierte 1931 das Positron

[P.A.M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A133, 60-72(1931)].

Es wurde 1932 von Carl Anderson entdeckt und beseitigte die Zweifel an der DIRAC-Theorie:

C.D. Anderson, Science 76, 238-239 (1932).

In der Relativistischen Quantenmechanik bleiben die Axiome der Quantentheorie ungeändert; es wird jedoch der Hamilton-Operator modifiziert:

- Der Zustand eines Systems wird durch einen Zustandsvektor in einem linearen Raum - dem Hilbertraum - beschrieben, $|\psi\rangle$
- Observablen werden durch hermitesche Operatoren dargestellt
- Der Mittelwert einer Observablen im Zustand $|\psi\rangle$ beschrieben, $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$ ("Erwartungswert")
- Bei einer Messung von A geht der ursprüngliche Zustand in den Eigenzustand $|u\rangle$ von A mit Eigenwert a_u über, $A|u\rangle = a_u|u\rangle$

Es folgt eine Einführung in die verwendete Notation, dann untersuchen wir die Eigenschaften der Klein-Gordon und Dirac-Gleichung mit der Interpretation als Einheitsnorm-Wellengleichung. Die Lösungen sind auch Basiszustände bei der Entwicklung der Feldoperatoren.

Notation: Einheiten

Die Grundgleichungen werden mit \hbar, c eingeführt, später setzen wir

$\hbar \equiv c \equiv 1$, so dass die Zeit die Dimension einer Länge hat, Energie, Impulse und Massen die

Dimension einer inversen Länge; Ladungen werden

dimensionslos ($e^2 = \frac{e^2}{\hbar c} \approx 1/137$)

Koordinaten: Zeitpunkt t und ein Punkt im

Osttraum $\vec{r} = (x, y, z)$ definieren einen

Raum-Zeit-Punkt

(x^0, x^1, x^2, x^3) mit $x^0 = ct$ Zeitkoordinate

$x^1 = x, x^2 = y, x^3 = z$ Raumkoord.

Die Indizes 0, 1, 2, 3 kennzeichnen Komponenten von Vierervektoren, (griech. Buchstaben μ, ν, \dots), 1, 2, 3 die Komponenten der gewöhnlichen

Räume, (lat. Buchstaben i, k, l, \dots):

$$x^\mu \equiv (x^0, x^k) \equiv (x^0, x^1, x^2, x^3)$$

$$(\mu = 0, 1, 2, 3) \quad (k = 1, 2, 3)$$

Metrischer Tensor, ko- und kontravariante Indizes

Die Metrik des Raum-Zeit-Kontinuums ist durch den metrischen Tensor definiert

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$g_{00} = 1, g_{kk} = -1, g_{\mu\nu} = 0 \quad \forall \mu \neq \nu$$

Man unterscheidet sog.

"kovariante" Vektoren : transformieren wie $\frac{\partial}{\partial x^\mu}$ (a_μ)

"kontravariante" " : " " " x^μ (a^μ)

Umwandlung durch Anwendung des metrischen Tensors:

$$a_\mu = \sum_\nu g_{\mu\nu} a^\nu, \text{ so dass}$$

$$a_0 = a^0, \quad a_k = -a^k$$

Einsteinsche Summenkonvention:

Über doppelt scheinende Indizes wird summiert:

$$\Rightarrow a_\mu = g_{\mu\nu} a^\nu$$

$$\Rightarrow \text{Hinaufziehen der Indizes: } a^\mu = g^{\mu\nu} a_\nu$$

$$\text{mit } g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu}$$

$$\text{Es ist } g_{\mu}{}^\nu = g_{\mu\sigma} g^{\sigma\nu} = g^\mu{}_\nu = \delta_\mu{}^\nu$$

$$\text{mit dem Kronecker-Symbol } \delta_\mu{}^\nu = \begin{cases} 1, & \mu = \nu \\ 0, & \mu \neq \nu \end{cases}$$

Dreis- und Viervektoren, Skalarprodukt

Für Dreivektoren im gewöhnlichen Ortsraum

benutzen wir $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$, so dass

$$a^\mu = (a^0, a^1, a^2, a^3) = (a^0, \vec{a}) \text{ mit } a^1 = a_x, a^2 = a_y, a^3 = a_z$$

$$\text{Skalarprodukt / Betrag des Vektors: } a = (\vec{a} \cdot \vec{a})^{1/2} = [a_x^2 + a_y^2 + a_z^2]^{1/2}$$

Oft wird beim 4er Vektor der Index μ weggelassen (a) wenn eine Verwechslung mit dem Betrag des 3er Vektors aus-

Das Skalarprodukt zweier 4er Vektoren a^μ, b^μ erhält man durch "Verjüngung" aus den jeweiligen ko- und kontravarianten Komponenten:

$$a_\mu b^\mu = a^\mu b_\mu = a^0 b^0 - \vec{a} \cdot \vec{b}$$

$$a_\mu a^\mu = (a^0)^2 - a^2 \text{ ist die Norm von } a \equiv a^\mu$$

Klassifizierung der 4er Vektoren

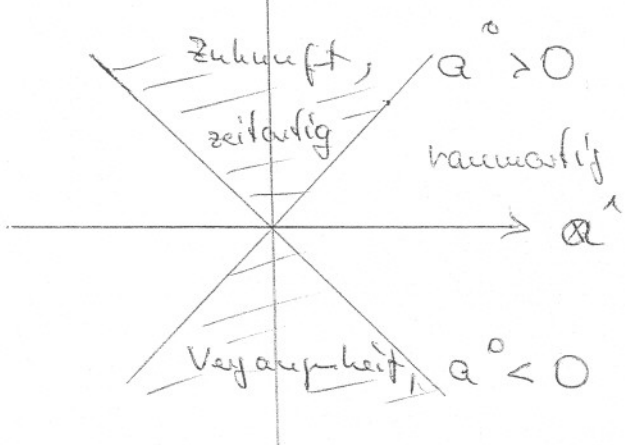
Je nach Vorzeichen ihres Norm gibt es drei Arten von 4er Vektoren:

$$a_\mu a^\mu < 0, \quad a^\mu \text{ raumartig}$$

$$a_\mu a^\mu = 0, \quad a^\mu \text{ Nullvektor}$$

$$a_\mu a^\mu > 0, \quad a^\mu \text{ zeitartig}$$

Dies entspricht der Lage des Vektors relativ zum Lichtkegel, $\uparrow a^0$



Gradient, Differentialoperatoren

$$\vec{\nabla} \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad \text{Nabla-Operator}$$

$$\Delta \equiv \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}$$

Die vier partiellen Differentialoperatoren $\frac{\partial}{\partial x^\mu}$ bilden einen kovarianten Vektor:

$$\begin{aligned} \partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} &\equiv \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3} \right) \\ &\equiv \left(\frac{\partial}{\partial ct}, \vec{\nabla} \right) \quad \text{Gradientenoperator} \end{aligned}$$

Der entsprechende kovariante Gradient ist

$$\partial^\mu \equiv g^{\mu\nu} \partial_\nu \equiv \left(\frac{\partial}{\partial ct}, -\vec{\nabla} \right)$$

Der d'Alembert-Operator ist

$$\square \equiv \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta = \partial_\mu \partial^\mu$$

$\epsilon^{\lambda\mu\nu\sigma}$ -Tensor

ein in allen vier Indices total antisymmetrischer Tensor:

$$\epsilon^{\lambda\mu\nu\sigma} = \begin{cases} +1 & , (\lambda\mu\nu\sigma) \text{ gerade Permutation v. } (0,1,2,3) \\ 0 & , \text{ zwei gleiche Indices} \\ -1 & , (\lambda\mu\nu\sigma) \text{ ungerade Permutation v. } (0,1,2,3) \end{cases}$$

Elektromagnetisches Feld

Das EM Potential besteht aus einem Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r}, t)$, und einem skalaren Potential $\phi(\vec{r}, t)$, die einen Viervektor bilden:

$$A^\mu \equiv (\phi, \vec{A})$$

Elektrisches Feld: $\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial x^0}$

Magnetisches Feld: $\vec{H} = \text{rot } \vec{A} \equiv \vec{\nabla} \times \vec{A}$

Die Komponenten von \vec{E} und \vec{H} bilden einen antisymmetrischen Tensor $F_{\mu\nu}$ im Raum-Zeit-Kontinuum:

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial A_\nu}{\partial x^\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x^\nu}, \text{ so dass}$$

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & E_x & E_y & E_z \\ -E_x & 0 & -H_z & H_y \\ -E_y & H_z & 0 & -H_x \\ -E_z & -H_y & H_x & 0 \end{pmatrix}$$

und

$$D_\mu \equiv \partial_\mu + ieA_\mu \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x^0} + ie\phi, \vec{\nabla} - ie\vec{A} \right).$$

Lorentz-Transformation (LT)

Beim Wechsel des Bezugssystems durch LT werden die Koordinaten linear und reell so transformiert, dass das Quadrat des Abstandes zweier Raum-Zeit-Punkte erhalten bleibt.

$$\boxed{x^\mu = \Omega^\mu_\nu x^\nu + a^\mu}$$

Der reelle Vektor a^μ ist eine einfache Translation der Raum-Zeit Achsen. Homogene LT mit $a^\mu = 0$:

$$\boxed{x^\mu = \Omega^\mu_\nu x^\nu}$$

Definition der LT durch $(\Omega^{\mu\nu} = g^{\mu\sigma} \Omega^\mu_\sigma)$

(1) $\Omega_{\mu\nu}^* = \Omega_{\mu\nu}$ reelle Transformation

(2) $\Omega_{\mu\nu} \Omega^{\lambda\mu} = \Omega_{\nu\mu} \Omega^{\lambda\mu} = \delta_\nu^\lambda$ Erhaltung des Abstandsquadrates

$\Rightarrow \det |\Omega^\mu_\nu| = \pm 1$ (+1: "eigentliche" LT; Richtungsinn der Raumachsen bleibt gleich)

Inverse Transformation:

$$\boxed{x^\mu = x'^\nu \Omega_\nu^\mu}$$

Die (homogene) Lorentz-Gruppe ist die Gruppe der linearen reellen Transformationen, bei denen die Skalarprodukte zwischen Vektoren erhalten bleiben.

2. Verbindung zw nichtrelativistischen QM

In der nichtrel. QM wird die Zeitentwicklung von Zuständen $|\psi\rangle$ durch die Schrödinger-Gleichung bestimmt (SE):

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle} \quad (SE)$$

Für ein freies Teilchen in Ortsdarstellung, $\langle \vec{r} |$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}}^2 \psi(\vec{r}, t).$$

- (1) Wegen der unterschiedlichen Ordnungen der zeitlichen und räumlichen Ableitungen ist die SE nicht Lorentz-kovariant ($\hat{=}$ relativistische Invarianz gegenüber LT): ihre Struktur ändert sich beim Übergang von einem Inertialsystem durch LT in ein anderes.
- (2) Die SE beschreibt nicht den Eigen Drehimpuls eines Teilchens, z.B. den Spin der Elektronen. Für nichtrelativistische Elektronen lässt sich dieser Mangel durch das "Rezept" von W. Pauli beheben: Z. Physik 43, 601 (1927): Die Wellenfunktion ψ wird durch eine zweikomponentige Wellenfunktion ersetzt,

$$\psi(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}, t) \\ \psi_2(\vec{r}, t) \end{pmatrix}$$

mit $|\psi_i(\vec{r}, t)|^2 d^3r$, $i=1,2$: Wahrscheinlichkeit, das Teilchen mit Spin in positiver ($i=1$) oder negativer ($i=2$) z-Richtung im Volumenelement d^3r um den Punkt \vec{r} zu finden.

Der Drehimpulsoperator \vec{J} setzt sich aus den Operatoren \vec{L} des Bahndrehimpulses, und $\frac{1}{2}\vec{\sigma}$ des Spins zusammen:

$$\vec{J} = \vec{L} + \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}, \quad \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma^1 \\ \sigma^2 \\ \sigma^3 \end{pmatrix}$$

Gesamtdrehimpuls-Operator

$$\vec{L} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \quad \text{Bahndrehimpuls-Operator}$$

mit den „Paulischen Spinmatrizen“

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Die so modifizierte Schrödinger-Theorie ist jedoch nicht relativistisch invariant.

Ziel ist deshalb, eine rel. invariante Gleichung zu finden, die den Spin „automatisch“ mit berücksichtigt.

Zum Aufstellen von -relativistischen oder nicht-relativistischen - Wellengleichungen benutzt man das Korrespondenzprinzip, d.h.

klassische Größen werden durch Operatoren ersetzt:

$$\left[\begin{array}{l} E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \\ \vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} = -i\hbar \vec{\nabla} \end{array} \right]$$

Damit ergibt sich aus der nichtrelativistischen Energie eines freien Teilchens

$$\left[E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \right]$$

die freie zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} |\psi\rangle.$$

In der speziellen Relativitätstheorie transformieren sich Energie E und Impuls $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ als

Komponenten eines kovarianten Vierervektors

$$p^\mu = (p^0, p^1, p^2, p^3) = \left(\frac{E}{c}, p_x, p_y, p_z \right) = \left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right)$$

Mit den kovarianten Komponenten

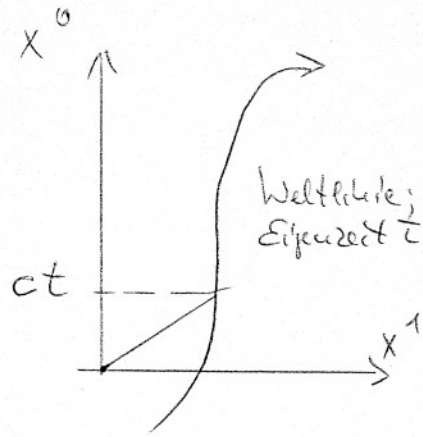
$$p_\mu = g_{\mu\nu} p^\nu = \left(\frac{E}{c}, -\vec{p} \right)$$

[ist das invariante Skalarprodukt (s.S. 14)

$$\left[p_\mu p^\mu = \frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 = m^2 c^2, \text{ mit der Ruhemasse } m. \right]$$

Ableitung der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung (RQM 13)

"Weltlinie" eines Teilchens in Parameterdarstellung: Ort eines klassischen relativistischen Punktteilchens der Masse $m > 0$ im Minkowski-Raum



$$X(t) = \begin{pmatrix} ct \\ \vec{x}(t) \end{pmatrix}$$

mit der Zeit t im Inertialsystem

Eigenzeit τ als Parameter auf der Weltlinie: die Zeit, die eine mit dem Teilchen bewegte Uhr anzeigt.

Im momentanen Ruhesystem des Teilchens gilt für das Differential der Weltlinie

$$dX' = \begin{pmatrix} cd\tau \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Mit der Invarianz des relativistischen Abstandsquadrats ist

$$\begin{aligned} (dX')^2 &= c^2 d\tau^2 = (dX)^2 = c^2 dt^2 - (d\vec{x})^2 \\ &= c^2 dt^2 \left(1 - \frac{v^2(t)}{c^2}\right) \end{aligned}$$

$$\text{mit } \vec{v}(t) = \frac{d\vec{x}}{dt}(t)$$

Der Zusammenhang zwischen τ und t wird

$$\tau = \int_{t_0}^t dt' \sqrt{1 - \frac{v^2(t')}{c^2}} \quad ; \quad \frac{dt}{d\tau} = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

4er Geschwindigkeit u und 4er Impuls p sind definiert durch

$$u^\mu \equiv c \frac{dx^\mu}{dt} = c \begin{pmatrix} \frac{dt}{dt} \\ \frac{d\vec{x}}{dt} \end{pmatrix} = \frac{c}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\vec{v}}{c} \end{pmatrix}$$

$$p^\mu \equiv m u^\mu = mc \frac{dx^\mu}{dt} = \frac{mc}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\vec{v}}{c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E/c \\ \vec{p} \end{pmatrix}$$

Im nichtrelativistischen Grenzfall $v \ll c$ gehen diese Ausdrücke in die gewöhnlichen Formeln für Energie und Impuls über - jedoch muss die Ruheenergie berücksichtigt werden:

$$\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \xrightarrow{v \ll c} 1 + \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2} + \dots$$

$$\Rightarrow \frac{E}{c} \rightarrow mc + \frac{1}{2} mc \frac{v^2}{c^2} \Rightarrow \boxed{E \rightarrow mc^2 + \frac{1}{2} m v^2}$$

$$\vec{p} \rightarrow m \vec{v}$$

Das invariante Skalarprodukt für einen 4er Impuls ergibt demnach

$$\boxed{p_\mu p^\mu = \frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 = m^2 c^2} \quad , \text{ s. 12.}$$

$$\Rightarrow \boxed{E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$$

3. Klein-Gordon-Gleichung

Wenden wir das Korrespondenzprinzip

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla} \quad ; \quad p^\mu \rightarrow i\hbar \partial^\mu$$

$$\left(\frac{E}{\hbar}, \vec{p} \right) \rightarrow i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla} \right)$$

auf die relativistische Energie-Impuls-Beziehung an,

$$E = \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4},$$

erhalten wir die Wellengleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2 + m^2 c^4} |\psi\rangle$$

Die Wurzel birgt jedoch Probleme: ihre Entwicklung ergibt es hohe Ableitungen, Ort und Zeit treten also unsymmetrisch auf und die relativistische Invarianz wird gebrochen.

Wir gehen deshalb von der quadratischen Relation aus,

$$E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4$$

und erhalten

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} |\psi\rangle = (-\hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2 + m^2 c^4) |\psi\rangle$$

mit jeweils 2. Ableitung in Ort und Zeit.

Division durch $-\hbar^2 c^2$ ergibt die offensichtlich Lorentz-kovariante Form

$$\left[\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] |\psi\rangle = 0$$

$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu}, \quad x^\mu = (x^0 = ct, \vec{x})$$

denn aus der Elektrodynamik ist bekannt,
dass der d'Alembertoperator

$$\square \equiv \partial_\mu \partial^\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 = g^{\mu\nu} \frac{\partial^2}{\partial x^\mu \partial x^\nu}$$

invariant gegenüber LT ist.

In der Wellengleichung erscheint die reduzierte
Compton-Wellenlänge des Teilchens mit Masse m ,

$$\frac{\hbar}{mc} \equiv \lambda_c \quad \left[\lambda_c^e \approx 3.86 \cdot 10^{-13} \text{ m} \right]$$

heißt die von Schrödinger, Pauli und Heisenberg
aufgestellte Gleichung

$$\left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] |\psi\rangle = 0$$

freie Klein-Gordon-
Gleichung, KGE

E. Schrödinger hat sie 1926 als relativist. Verallgemeinerung
der SE 1926 vorgeschlagen, O. Heisenberg und W. Pauli
haben sie im Detail untersucht.

Mit dem 4er Impuls als Operator $p^\mu \equiv i\hbar \partial^\mu$
lässt sie sich auch schreiben als

$$\left[p_\mu p^\mu - m^2 c^2 \right] |\psi\rangle = 0$$

3.1 Eigenschaften der LGE

sie erfüllt die Kontinuitätsgleichung;

Zur Herleitung aus der LGE bildet man

$$\psi^* \left[\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi = 0$$

und subtrahiert die komplex konjugierte Gleichung,

$$\psi \left[\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi^* = 0$$

\Rightarrow

$$\psi^* \partial_\mu \partial^\mu \psi - \psi \partial_\mu \partial^\mu \psi^* = 0$$

$$\partial_\mu (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) = 0$$

Damit die Stromdichte der nichtrelativistischen entspricht, multiplizieren wir mit $\frac{\hbar}{2mi}$, $\partial_\mu \equiv \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla} \right)$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{i\hbar}{2mc^2} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}) \right] + \vec{\nabla} \cdot \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*] = 0$$

Dies hat die Form einer Kontinuitätsgleichung

$$\dot{\rho} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

mit der Dichte

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right], \text{ und der Stromdichte}$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right].$$

bzw. in kovarianter Notation mit $j^\mu \equiv (c\rho, \vec{j})$:

$$\partial_\mu j^\mu = 0$$

In relativistischer Formulierung ist die Normierung meist so gewählt, dass

$$j_{KG}^\mu \equiv -i\hbar c^2 (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*), \quad \rho_{KG} = i\hbar (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t})$$

so dass der Energie-Eigenzustand

$$\psi = \bar{\psi}(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar} \Rightarrow \boxed{\rho = 2E |\bar{\psi}|^2}$$

und $|\bar{\psi}| = 1$ entspricht $2E$ Teilchen pro Einheitsvolumen

Die Verbindung zum "Schwölinger-Strom" ist dann

$$\vec{j}_S = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) = \frac{1}{2mc^2} \vec{j}_{KG}$$

und \vec{j}_S hat $E/(mc^2)$ Teilchen pro Einheitsvolumen für $|\bar{\psi}| = 1$

Als Folge der 2. Zeitableitung in der LGE ist jedoch ρ nicht positiv definit, und daher keine Wahrscheinlichkeitsdichte, sondern evtl. $e \cdot \rho(\vec{x}, t)$ eine Ladungsdichte.

(Bei einer DGL 2. Ordnung wie der LGE können die Anfangswerte von ψ und $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ unabhängig voneinander vorgegeben werden, so dass $\rho(\vec{x})$ positiv oder negativ sein kann).

Freie Lösungen der LGE

Es gibt zwei freie Lösungen in Form von ebenen Wellen:

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{-i(Et - \vec{p} \cdot \vec{x}) / \hbar}$$

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

(Reifen durch Einsetzen)

Es treten positive und negative Energien auf, die Energie ist nicht nach unten beschränkt. Die Theorie ist skalär, sie enthält keinen Spin und könnte nur neutrale Spin 0 Mesonen (z.B. π^0) beschreiben. Als Quantenfeldtheorie beschreibt die LGE Mesonen, das hermitesche skalare Klein-Pauli Feld beschreibt neutrale Mesonen mit Spin 0, das nichthermitesche pseudoskalare Feld geladene Mesonen und ihre Antiteilchen mit Spin 0, siehe QFT-Vorlesung.

Im Rahmen der RQM lässt sich das KGE-

Problem negativer Energien ($\hat{=}$ Massen im feldfreien Fall) umgehen, indem man eine Interpretation des 4er Vektors j^μ ändert:

- $j^\mu \rightarrow e j^\mu(x) \hat{=} \text{ Stromdichte-Vektor, d.h. insbesondere}$
- $\rho \rightarrow e g(x) \hat{=} \text{ elektrische Ladungsdichte; nicht positiv definit}$

Die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_\mu j^\mu = 0$$

beschreibt dann die Ladungserhaltung, während die Teilchenzahl nicht erhalten ist.

[W. Pauli, V. Weisskopf, Helv. Phys. Acta 7, 709 (1934)].

\Rightarrow es können Teilchenpaare mit entgegengesetzter Ladung erzeugt und vernichtet werden, bei dieser Interpretation ist die KGE keine Eineteilchen-Theorie mehr, sondern eine "Theorie der Ladung".

(Erst mit der Dirac-Theorie kann eine positive definite Dichte für ein Teilchen eingeführt werden, auch dort bleiben jedoch negative Energien, so dass die Eineteilchen-Interpretation nur begrenzt möglich ist).

3.2 Wechselwirkung mit elektromagnetischen Feldern;
Eichinvarianz

Die HW eines relativistischen Spin-0-Teilchens mit einem elektromagnetischen Feld wird in der LGE wie in der SE durch "minimale Kopplung" berücksichtigt:

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} &\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\phi \\ \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} &\rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \end{aligned} \right\} p^\mu \rightarrow p^\mu - \frac{e}{c} A^\mu$$

mit der Ladung e des betrachteten Teilchens, und dem elektromagnetischen Vektorpotential

$$A^\mu = \begin{pmatrix} A^0 \\ \vec{A} \end{pmatrix}, \quad A^0 = \phi$$

Damit wird die LGE mit em. Feld:

$$\left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\phi \right)^2 - c^2 \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - m^2 c^4 \right] |\psi\rangle = 0$$

bzw. in kovarianter Form

$$\boxed{\left[\left(p_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right) \left(p^\mu - \frac{e}{c} A^\mu \right) - m^2 c^4 \right] |\psi\rangle = 0.}$$

Die Maxwellischen Gleichungen sind invariant unter lokalen Eichtransformationen der Art

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad \vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} \chi$$

bzw.

$$\boxed{A^\mu \rightarrow A'^\mu = A^\mu - \partial^\mu \chi}$$

mit $\chi = \chi(x)$ eine beliebige reelle skalare Funktion der Raumzeit-Koordinaten.

Diese lokale Eichinvarianz lässt sich wie in der nichtrelativistischen Theorie auf die LGE übertragen, indem man die Wellenfunktion ψ durch Multiplikation einer Phase geeignet transformiert:

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = e^{i\Lambda(x)} \psi(x).$$

Um $\Lambda(x)$ zu finden, setzen wir die geschriebenen Größen in die LGE ein und finden:

$$\begin{aligned} 0 &= \left[(p_\mu - \frac{e}{c} A'_\mu - \frac{e}{c} \partial_\mu \chi) (p^\mu - \frac{e}{c} A'^\mu - \frac{e}{c} \partial^\mu \chi) - m^2 c^2 \right] \psi' \\ &= \left[(p_\mu - \frac{e}{c} A'_\mu - \frac{e}{c} \partial_\mu \chi) e^{-i\Lambda} (p^\mu - \frac{e}{c} A'^\mu - \frac{e}{c} \partial^\mu \chi + \hbar \partial^\mu \Lambda) - m^2 c^2 e^{-i\Lambda} \right] \psi' \\ &= e^{-i\Lambda} \left[(p_\mu - \frac{e}{c} A'_\mu - \frac{e}{c} \partial_\mu \chi + \hbar \partial_\mu \Lambda) \cdot (p^\mu - \frac{e}{c} A'^\mu - \frac{e}{c} \partial^\mu \chi + \hbar \partial^\mu \Lambda) - m^2 c^2 \right] \psi' \end{aligned}$$

\Rightarrow Mit der Wahl

$$\Lambda(x) = \frac{e}{\hbar c} \chi(x)$$

geht dies in die Form der LGE über,

$$\left[(p_\mu - \frac{e}{c} A'_\mu) (p^\mu - \frac{e}{c} A'^\mu) - m^2 c^2 \right] \psi' = 0$$

(Beweis durch Nachrechnen)

RPH

Da physikalische Observable durch Erwartungswerte $\langle \psi | \dots | \psi \rangle$ dargestellt werden, spielt ein gemeinsamer globaler Phasenfaktor $\Lambda(x)$ in ψ keine Rolle; die LGE mit minimaler Kopplung ist deshalb unter lokalen Eichtransformationen des em. Feldes invariant.

Kontinuitätsgleichung mit Feld:

Multipliziert man die LGE mit Feld von links mit $\langle \psi^* |$ und subtrahiert davon das komplex konjugierte, folgt die Kont. Gleichung als

$$\frac{\partial \rho(x)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(x) = 0 \quad \text{mit}$$

$$\rho(x) = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right] - \frac{e}{mc^2} A^0 \psi^* \psi$$

$$\vec{j}(x) = -\frac{i\hbar}{2m} \left[\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right] - \frac{e}{mc} \vec{A} \psi^* \psi$$

(wiechelt mit dem Faktor $\frac{\hbar}{2m}$, analog zu nichtrel. QM)

bzw in Lorentz-kovarianter Form

$$\boxed{\partial_\mu j^\mu = 0} \quad \text{mit } (j^\mu) = \begin{pmatrix} \rho \\ \vec{j} \end{pmatrix},$$

$$\boxed{j^\mu = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^* \right] - \frac{e}{mc} A^\mu \psi^* \psi}$$

oder in "relativistischer" Normierung $j_{KG} = 2mc^2 j_S$:

$$j_{KG}^\mu = -i\hbar c^2 \left[\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^* \right] - 2ce A^\mu \psi^* \psi$$

Aus der Kontinuitätsgleichung folgt durch Integration über den gesamten Raum der Erhaltungssatz

$$Q = \int d^3x \rho(x) = \text{const} \Rightarrow \text{Ladungserhaltung.}$$

Je doch ist wieder $\rho(x)$ nicht positiv definit, da ψ und $\partial\psi/\partial t$ $\forall t$ willkürliche Werte annehmen können, so dass ρ und \vec{j} nicht als Wahrscheinlichkeitsgrößen interpretiert werden können.

\Rightarrow Suche nach einer relativistischen Wellengleichung von erster Ordnung in der Zeit, und mit positiv definiten Wahrscheinlichkeitsdichte: DIRAC-Gleichung. Sie hat allerdings wie die KGE-Lösungen mit negativen Energieeigenwerten.

3.3 Hamiltonsche Form der KGE

Die KGE (DGL 2. Ordnung) lässt sich in ein System von gekoppelten DGLn erster Ordnung überführen ("Schrödinger-artige" Form) durch die Einsetzungen (ψ Lösung der KGE)

$$\psi = \phi + \varphi, \quad \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - eA^0 \right) \psi = mc^2 (\phi - \varphi)$$
$$\bar{\psi} = \begin{pmatrix} \phi \\ \varphi \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \phi = \frac{1}{2mc^2} \left(mc^2 + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - eA^0 \right) \psi$$

$$\varphi = \frac{1}{2mc^2} \left(mc^2 - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + eA^0 \right) \psi$$

$$\Rightarrow (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - eA^0)(\phi + \varphi) = mc^2(\phi - \varphi)$$

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - eA^0)(\phi - \varphi) = \left[\frac{1}{m} (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2 + mc^2 \right] (\phi + \varphi)$$

Addition u. Subtraktion dieser Gleichungen ergibt ein gekoppeltes DGL-System 1. Ordnung

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{2m} (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2 (\phi + \varphi) + (mc^2 + eA^0)\phi$$

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{1}{2m} (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2 (\phi + \varphi) - (mc^2 - eA^0)\varphi$$

und mit $\bar{\Psi} = \begin{pmatrix} \phi \\ \varphi \end{pmatrix}$ folgt die LGE in Hamiltonscher Form,

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} = H \bar{\Psi}}$$

$$\boxed{H = \frac{\sigma_3 + i\sigma_2}{2m} (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2 + \sigma_3 mc^2 + eA^0}$$

mit den Pauli-Matrizen

(H ist nicht hermitesch, da $i\sigma_2$ nicht hermitesch ist)

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\boxed{i\sigma_2 = -(i\sigma_2)^\dagger}$$

Für die Lösungen der freien LGE folgt

$$i\hbar \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} = H_0 \bar{\Psi}, \quad H_0 = \frac{\sigma_3 + i\sigma_2 \frac{p^2}{\hbar^2}}{2m} + \sigma_3 mc^2$$

mit dem Lösungsausatz

$$\bar{\Psi}(x) = \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \varphi_0 \end{pmatrix} e^{i(\vec{p}\vec{x} - Et)/\hbar}$$

$$\bar{\Psi}_{\vec{p}}^{(-)}(x) = \begin{pmatrix} mc + p_0 \\ mc - p_0 \end{pmatrix} e^{-ip_\mu x^\mu / \hbar}$$

$$\bar{\Psi}_{\vec{p}}^{(+)}(x) = \begin{pmatrix} mc - p_0 \\ mc + p_0 \end{pmatrix} e^{+ip_\mu x^\mu / \hbar}$$

Da H nicht hermitesch ist, gibt es keine positiv definite Wahrscheinlichkeitsdichte mit erhaltener Gesamt-Wahrscheinlichkeit:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int d^3x \bar{\Psi}^+ \Psi$$

$$\langle \bar{\Psi} | \hat{O} | \Psi \rangle = \int d^3x \bar{\Psi}^+ \hat{O} \Psi \quad (\hat{O} \text{ linearer Operator})$$

$$\langle \bar{\Psi} | \hat{O} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{O} | \bar{\Psi} \rangle^*$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi, \quad i\hbar \bar{\Psi}^+ \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \bar{\Psi}^+ H \Psi$$

$$-i\hbar \frac{\partial \bar{\Psi}^+}{\partial t} \Psi = (H \Psi)^+ \Psi = (\bar{\Psi}^+ H \Psi)^*$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \bar{\Psi} | \Psi \rangle &= \langle \bar{\Psi} | H | \Psi \rangle - \langle \bar{\Psi} | H | \Psi \rangle^* \\ &= \langle \bar{\Psi} | H - H^+ | \Psi \rangle \neq 0. \end{aligned}$$

Aufgrund der Nicht-Hermitizität von H sind seine Eigenzustände i.a. nicht orthogonal, und e^{iHt} ist nicht unitär \Rightarrow Heisenberg- und Schrödinger-Bild ergeben unterschiedliche Resultate.

Da H nicht hermitesch ist, gibt es keine
positive definite Wahrscheinlichkeitsdichte
mit erhaltenem Gesamt-Wahrscheinlichkeit:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int d^3x \bar{\Psi}^+ \Psi$$

$$\langle \bar{\Psi} | \hat{O} | \Psi \rangle = \int d^3x \bar{\Psi}^+ \hat{O} \Psi \quad (\hat{O} \text{ linearer Operator})$$

$$\langle \bar{\Psi} | \hat{O} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{O} | \bar{\Psi} \rangle^*$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi, \quad i\hbar \bar{\Psi}^+ \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \bar{\Psi}^+ H \Psi$$

$$-i\hbar \frac{\partial \bar{\Psi}^+}{\partial t} \Psi = (H \Psi)^+ \Psi = (\bar{\Psi}^+ H \Psi)^*$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \bar{\Psi} | \Psi \rangle &= \langle \bar{\Psi} | H | \Psi \rangle - \langle \bar{\Psi} | H | \Psi \rangle^* \\ &= \langle \bar{\Psi} | H - H^+ | \Psi \rangle \neq 0. \end{aligned}$$

Aufgrund der Nicht-Hermitizität von $H (\neq H^+)$
sind reine Eigenzustände i.a. nicht orthogonal,
und e^{iHt} ist nicht unitär \Rightarrow Heisenberg- und
Schrödinger-Bild ergeben unterschiedliche Resultate.

3.4 KGE im Coulomb-Potential

Die KGE mit em. Feld war (S. 21)

$$\left[(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\phi)^2 - c^2 \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - m^2 c^4 \right] \psi = 0$$

Für zeitunabhängiges \vec{A}, ϕ sind die stationären Lösungen mit positiver Energie

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{-iEt/\hbar} \varphi(\vec{x}), \quad E > 0$$

⇒ zeitunabhängige KGE:

$$(E - e\phi)^2 \varphi - c^2 \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \varphi + m^2 c^4 \varphi = 0$$

Für ein sphärisch symmetrisches Potential wird das Coulomb-Feld

$$\phi(\vec{x}) \rightarrow \phi(r), \quad r = |\vec{x}|, \quad \text{und } \vec{A} = 0 \text{ folgt}$$

$$\left(-\hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2 + m^2 c^4 \right) \varphi(\vec{x}) = [E - e\phi(r)]^2 \varphi(\vec{x})$$

Wie in der nichtrelativistischen QM wird die Gleichung durch Separationsansatz gelöst; in sphärischen

Polarkoordinaten

$$\varphi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

└ Kugelfunktionen

⇒ Radialgleichung:

$$\left(-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \frac{d}{dr} r + \frac{e(e+1)}{r^2} \right) R(r) = \frac{(E - e\phi(r))^2 - m^2 c^4}{\hbar^2 c^2} R(r)$$

Betrachte zunächst den nichtrelativistischen

Grenzfall:

$$E \approx mc^2 + E', \quad E' - e\phi \ll mc^2$$

⇒ nichtrelativistische radiale Schrödinger-Gleichung,
denn die r.h.s. wird

$$\frac{1}{\hbar^2 c^2} \left[(mc^2)^2 + 2mc^2 (E' - e\phi(r)) + (E' - e\phi(r))^2 - m^2 c^4 \right] R(r)$$

$$\approx \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E' - e\phi(r)) \right] R(r) \quad \text{mit der nichtrelativistischen Energie } E'$$

Für ein π^- Meson im Coulombfeld eines Kerns mit Ladungszahl Z:

$$m_{\pi^-} = 139.57 \text{ MeV} \approx 273 m_e$$

$$\text{mittl. Lebensdauer } \tau_{\pi^-} \approx 2.60 \cdot 10^{-8} \text{ s}$$

klass. "Umlaufzeit" aus der Kreisfrequenz

$$\Delta x \Delta p \approx a_{\pi} m_{\pi} \frac{a_{\pi}}{t} \approx \hbar \quad ; \quad a_{\pi} \approx \frac{\hbar}{m_{\pi}} \alpha_B \approx \frac{1}{273} \cdot 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$\Rightarrow \tau \approx \frac{m_{\pi} a_{\pi}^2}{\hbar} \approx 1.8 \cdot 10^{-13} \text{ s} \approx 180 \text{ fm}$$

$$\hbar \approx 1: \text{ MeV} \cdot \text{fm} \approx 1/197.33$$

$$1 \text{ s} \approx 3 \cdot 10^{23} \text{ fm}$$

$$\approx \frac{139 \cdot 180^2}{197.33} \cdot \frac{1}{3 \cdot 10^{23}} \text{ s}$$

$$\boxed{\tau \approx 7.6 \cdot 10^{-20} \text{ s}} \ll \tau_{\pi^-} \approx 2.6 \cdot 10^{-8} \text{ s}$$

⇒ Trotz der endlichen π^- Lebensdauer gibt es wohldefinierte stationäre Eigenzustände.

Das Coulombpotential des Kerns ist

$$e\phi(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$

und mit den Feinstrukturkonstanten

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \quad \text{wird die Radialgleichung}$$

$$\left[-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \frac{d}{dr} r + \frac{l(l+1) - Z^2 \alpha^2}{r^2} - \frac{2Z\alpha E}{\hbar c r} - \frac{E^2 - m^2 c^4}{\hbar^2 c^2} \right] R = 0$$

Substituiere: $\rho^2 = \frac{4(m^2 c^4 - E^2)}{\hbar^2 c^2}$; $\rho = Z\alpha$

$$\lambda = \frac{2E\rho}{\hbar c \sigma}; \quad \rho = \sigma r$$

⇒ kompakte Form der Radialgleichung für die neue Variable ρ :

$$\left[\frac{d^2}{d(\rho/2)^2} + \frac{2\lambda}{\rho/2} - 1 - \frac{l(l+1) - \rho^2}{(\rho/2)^2} \right] \rho R(\rho) = 0$$

Das ist die Gestalt der nichtrelativistischen SE für die Funktion $u \equiv \rho R$, wenn wir ersetzen

$$\rho_0 \rightarrow 2\lambda \quad (\rho_0 = \sqrt{\frac{2m}{|E|}} \cdot \frac{Ze^2}{\hbar})$$

$$l(l+1) \rightarrow l(l+1) - \rho^2 \equiv l'(l'+1)$$

(l' i.a. nicht ganzzahlig)

(Auch in der klassischen relativistischen Mechanik findet sich eine solche Änderung des Zeitfunktionswertes; das sind die elliptischen Kepler-Bahnen nicht mehr geschlossen, sondern werden zu Rosettenbahnen).

Die Radialgleichung wird analog zum ungestörten Fall gelöst:

$$R(\rho) \begin{cases} \rho^{l'+1}, & \rho \rightarrow 0 \\ e^{-\rho/2}, & \rho \rightarrow \infty \end{cases}$$

⇒ Lösungsansatz:

$$\rho R(\rho) = \left(\frac{\rho}{2}\right)^{l'+1} e^{-\rho/2} w(\rho/2)$$

mit der DGL für $w(\rho)$ analog zum Schwächlingsfall:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l'(l'+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right] u(\rho) = 0$$

$$u(\rho) = \rho^{l'+1} e^{-\rho} w(\rho)$$

$$\rho \frac{d^2 w}{d\rho^2} + 2(l'+1-\rho) \frac{dw}{d\rho} + (\rho_0 - 2(l'+1))w = 0$$

Lösung durch Potenzreihenansatz

$w(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$. Die aus der DGL folgende Rekursionsrelation ergibt eine Funktion $\propto e^{-\rho/2} \rho^{\rho_0/2}$ (s.S. 31). Damit $R(\rho)$ normierbar bleibt, muss die Reihe abbrechen.

einsetzen
ergibt

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k [k(k-1) p^{k-1} + 2(l'+1) k p^{k-1} - 2k p^k + (p_0 - 2(l'+1)) p^k] = 0$$

Die Koeffizienten jeder Potenz von p müssen Null sein, also für p^k :

$$[(k+1)k + 2(l'+1)(k+1)] a_{k+1} + [-2k + (p_0 - 2(l'+1))] a_k = 0$$

⇒ Rekursionsrelation zur Berechnung von

a_{k+1} aus a_k :

$$a_{k+1} = \frac{2(k+l'+1) - p_0}{(k+1)(k+2l'+2)} \cdot a_k$$

Für die Konvergenz ist das Verhältnis $\frac{a_{k+1}}{a_k}$ für $k \rightarrow \infty$ relevant:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{2}{k}$$

Vergleich mit der Exponentialreihe

$$e^{2p} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (2p)^k$$

mit den aufeinander folgenden Koeffizienten

$$\frac{2^{k+1} / (k+1)!}{2^k / k!} = \frac{2}{k+1} \approx \frac{2}{k}$$

dh. die Reihe für $w(p)$ verhält sich wie e^{2p} . Damit nicht $u(p) \propto e^{-p} w(p) \rightarrow e^p$ für große p resultiert, (sonst ist $u(p)$ nicht normierbar) muss die Reihe abbrechen.

Bricht die Reihe nach dem N-ten Glied ab,
ist $w(\rho)$ ein Polynom N-ten Grades.

Die Abbruchbedingung

$a_{N+1} + a_{N+2} = \dots = 0$ ergibt mit der Rekursionsrelation

$$\boxed{\rho_0 = 2(N + l' + 1)}$$

$N = 0, 1, 2,$

radiale Quantenzahl

mit $\rho_0 \rightarrow 2\lambda \Rightarrow$

$$\lambda = N + l' + 1$$

(bit auf l' analog zum Schwödlyerfall)

Zur Bestimmung der Energieeigenwerte eliminieren wir σ :

$$\sigma = \frac{2E\rho}{\hbar c \lambda} \Rightarrow \sigma^2 = \frac{4E^2 \rho^2}{\hbar^2 c^2 \lambda^2} = \frac{4(m^2 c^4 - E^2)}{\hbar^2 c^2}$$

und erhalten die Energieeigenwerte

$$\boxed{E = mc^2 \left(1 + \frac{\rho^2}{\lambda^2} \right)^{-1/2}}$$

(positive Wurzel, da $\sigma > 0, \lambda > 0 \Rightarrow E > 0$)

\Rightarrow Für verschwindende Auslenkung $\rho = 2\alpha \rightarrow 0$ geht die Energie dieser Lösungen gegen die

Ruheenergie,

$$\boxed{E \rightarrow mc^2 \quad \rho \rightarrow 0}$$

Berechnung von l' aus der Definitionsgleichung

$$l'(l'+1) = l(l+1) - \rho^2$$

$$\Rightarrow l' = -\frac{1}{2} \left(\frac{+}{-} \right) \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - \beta^2} \quad (\text{unw} + \text{zulässig, damit die linet. Energie endlich bleibt}).$$

$$\Rightarrow E_{nl} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{\beta^2}{\left[N + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - \beta^2} \right]^2}}}$$

In nichtrelativistischer Notation ist die Hauptquantenzahl

$$n = N + l + 1 ; \text{ damit wird } E \quad (n=1,2,\dots, \quad l=0,1,\dots,n-1)$$

$$E_{nl} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{\beta^2}{\left[n - \left(l + \frac{1}{2} \right) + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - \beta^2} \right]^2}}}$$

Die in der nichtrel. Theorie vorhandene Entartung bezüglich des Drehimpulses ist hier aufgehoben.

Entwicklung der Energie in eine Potenzreihe ergibt

$$E_{nl} = mc^2 \left[1 - \frac{\beta^2}{2n^2} - \frac{\beta^4}{2n^4} \left(\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right] + \mathcal{O}(\beta^6)$$

$$E_{nl} = mc^2 - \frac{R_y}{n^2} - \frac{R_y \beta^2}{n^3} \left(\frac{1}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) + \mathcal{O}(R_y \beta^4)$$

Ruheenergie nichtrel. relativistische Korrektur
 Rydberg-Energie, Korrektur

$$R_y = \frac{mc^2 (Z\alpha)^2}{2} = \frac{m Z^2 e^4}{2\hbar^2} \quad (= 13.6 \text{ eV für } Z=1).$$

Die relativistische Korrektur hebt die Energie in l auf:

$$E_{l=0} - E_{l=n-1} = - \frac{4RyZ^2}{n^3} \frac{n-1}{2n-1}$$

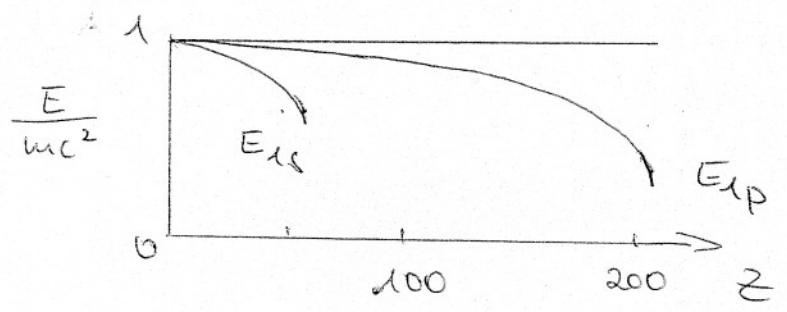
Damit l' und die Energieeigenwerte well zahl, muss (o. Ausdruck für l') gelten

$$l + \frac{1}{2} \geq Z\alpha$$

Für s-Zustände mit l=0 bedeutet das

$$Z < \frac{1}{2\alpha} = \frac{137}{2} = 68.5 \quad ; \quad \text{für } l=1, \quad Z < 205.5$$

für größere Z wird das System instabil, die Lösungen zum Coulomb-Potential werden für Z > 68 unphysikalisch. Reale Kerne haben jedoch einen endlichen Radius (keine Punktladung), für den Bindungszustände auch für Z > 68.5 existieren; s. 3.5.



Beim Vergleich mit realen plausiblen Atomen muss demnach:

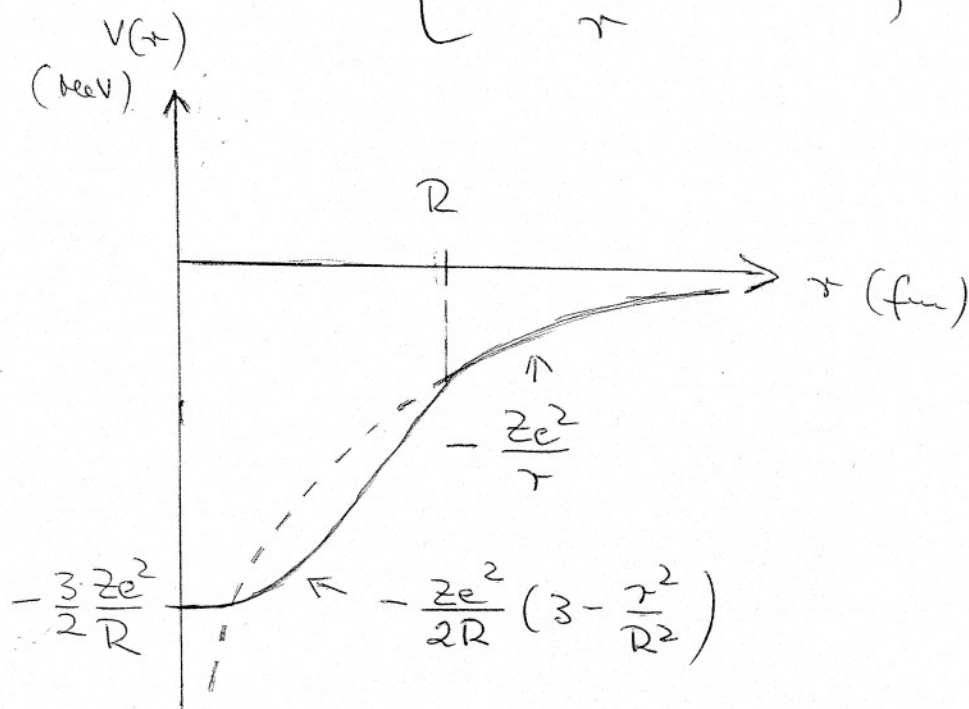
- Das endliche Kernradius berücksichtigt werden
- Die Masse m_{π} durch die reduzierte Masse ersetzt werden, $\mu = \frac{m_{\pi} M}{m_{\pi} + M}$
- Die Vakuumpolarisation muss berücksichtigt werden (virtuelle Elektron-Positron-Paare)
- Die starke WW Plou-kern muss abgeleitet werden.

3.5 Oszillator-Coulomb-Potential

Die exaktere Ausdehnung des $l=0$ Binnungszustände ermöglicht, lässt sich durch ein Oszillator-Coulomb-Potential berücksichtigen.

Wir betrachten dazu den Kern näherungsweise als homogen geladene Kugel, mit Potential

$$eA^0(r) = V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{2R} \left(3 - \frac{r^2}{R^2} \right) & ; r \leq R \\ -\frac{Ze^2}{r} & ; r > R \end{cases}$$



$R \approx 10 \text{ fm}$

$Z = 82$

$V(0) = -17.7 \text{ MeV}$

$\left(\frac{82 \cdot 197 \cdot 1.5 \text{ MeV}}{20.137} \right)$

$(R = 1.2 A^{1/3} \text{ fm})$

$\approx 7.11 \text{ fm}$

Die Radialgleichung wird auch für dieses Potential durch Potenzreihenansatz gelöst (siehe z.B. A. Wachs, Relativist. QM, Springer, pp. 82 - 87). Es ergibt sich ein nahezu linearer Zusammenhang zwischen dem Zustandsbewegten E und der Kernladungszahl Z , und es existieren auch für große Z - und kleine l -Werte relativ-naher Zustände

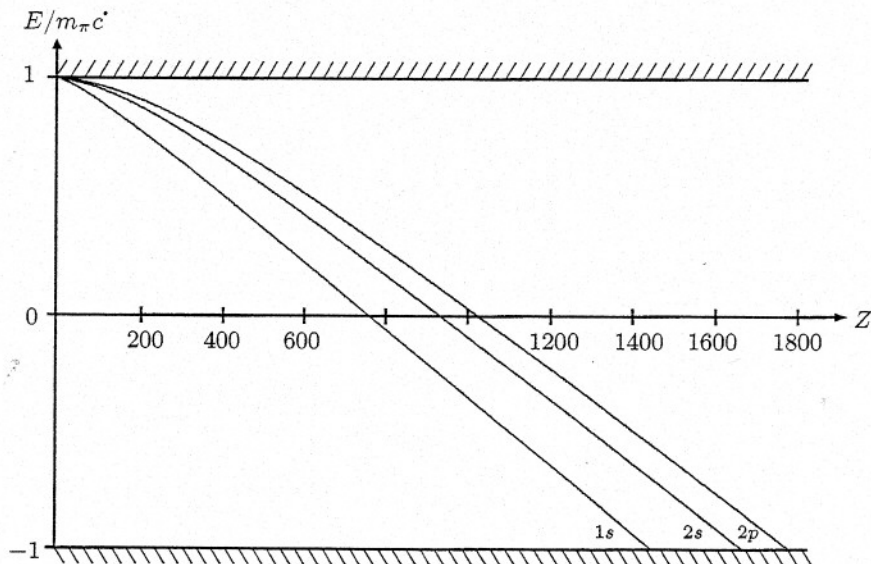


Abb. 1.10. Energiewerte gebundener 1s-, 2s- und 2p-Pionzustände im Feld einer homogen geladenen Kugel (Oszillator-Coulomb-Potential) als Funktion von Z . Der Kugelradius (Kernradius) beträgt $R = 10$ fm.

verschiedene Kernladungszahlen Z der V-Erwartungswert des 1s-Pionradius, $\langle r \rangle_V$, das elektrostatische Oszillator-Coulomb-Potential V an der Stelle $\langle r \rangle_V$, die Bindungsenergie $E_B = E_{1s} - m_\pi c^2$ sowie die mittlere quadratische Abweichung $\Delta r = \sqrt{\langle r^2 \rangle_V - \langle r \rangle_V^2}$ angegeben. Vergleicht man diese Werte mit der Ruheenergie $m_\pi c^2 = 139.577$ MeV des Pions und seiner Compton-Wellenlänge $\lambda_\pi = 1.414$ fm, so folgt für den schwachen Bindungsfall

$$Z = 2: |E_B|, |V(\langle r \rangle_V)| \ll m_\pi c^2, \Delta r \gg \lambda_\pi.$$

	$Z = 2$	$Z = 1450$
$\langle r \rangle_V$	146.4 fm	3.7 fm
$V(\langle r \rangle_V)$	-0.02 MeV	-298.9 MeV
E	-0.05 MeV	-278.8 MeV
Δr	84.3 fm	1.6 fm

\Rightarrow Einteilchenkonzept
gültig

Tab. 1.1. Kennzahlen des gebundenen 1s-Pionzustandes im Oszillator-Coulomb-Potential für den schwachen ($Z = 2$) und starken ($Z = 1450$) Bindungsfall.

Bei starker Bindung; sei $Z = 1450$:

$$|E_B|, |V(\langle r \rangle_V)| \approx 2m_\pi c^2, \Delta r \approx \lambda_\pi$$

\Rightarrow Einteilchenkonzept nicht mehr gültig!

[aus: A. Wachs, Relat. QM, Springer, pp. 85f.]

Eine direkte Bestätigung dieser Feststellungen ergibt sich durch die Betrachtung der radialen Ladungsdichte des 1s-Pionzustandes,

$$r^2 \rho(r) = \frac{E - V(r)}{m_\pi c^2} u_l^2(r) .$$

Im schwachen Bindungsfall ($Z = 2$) ist E positiv, und die radiale Ladungsdichte ist, wie gewünscht, positiv definit. Demgegenüber besitzt die radiale Ladungsdichte im starken Bindungsfall ($Z = 1450$) aufgrund des zugehörigen negativen Energiewertes keinen einheitlichen Verlauf und geht ab $r \approx 15$ fm in negative Werte über, was mit dem Ein-Teilchenkonzept unvereinbar ist (siehe Abb. 1.11). Die physikalische Bedeutung dieses Vorzeichenwechsels in starken Feldern (wie auch beim Kastenpotential und Potentialtopf) lässt sich letztlich nur im Rahmen von Quantenfeldtheorien richtig verstehen, wo die Teilchenzahl variabel ist.

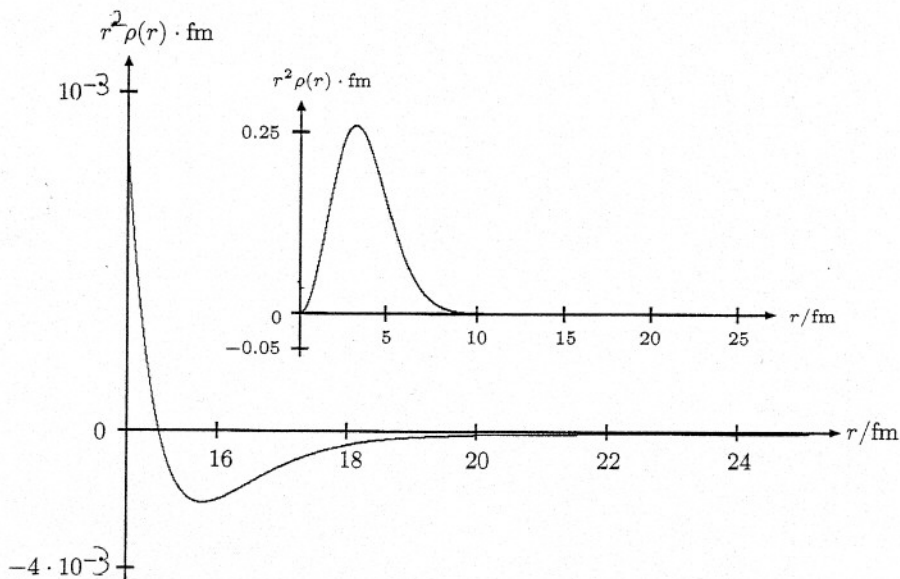


Abb. 1.11. V-normierte radiale Ladungsdichte des 1s-Pionzustandes im Oszillator-Coulomb-Potential mit $Z = 1450$ und $R = 10$ fm. Die große Grafik zeigt einen vergrößerten Ausschnitt der kleinen Grafik. Bei $r \approx 15$ fm wechselt die Ladungsdichte ihr Vorzeichen.

4. DIRAC-Gleichung (DE)

4.1 Einleitung

Um die mit der LGE verbundenen Schwierigkeiten zu vermeiden - insbesondere nicht positive-definite Dichte-, suche P. DIRAC nach einer in den zeitlichen und räumlichen Ableitungen linearen Gleichung:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H_D \psi}$$

mit dem DIRAC-Operator

$$\boxed{H_D = \frac{\hbar c}{i} \alpha^k \partial_k + \beta m c^2},$$

da bei korrekter Wahl von α^k ($k=1,2,3$) und β die DE ergibt (summiere über doppelte Indizes!).

Da die Gleichung von 1. Ordnung in der Zeit ist, bleibt die Dichte positiv; wegen der Forderung relativistischer Invarianz dürfen dann auch alle räumlichen Ableitungen von 1. Ordnung sein.

Der Dirac-Hamiltonoperator H_D ist linear im Impulsoperator und in der Ruheenergie.

Damit H_D hermitisch ist - $H_D = H_D^\dagger$ - müssen α^k und β hermitesche $N \times N$ Matrizen sein.

(wird einfache Zahlen, da die Gleichung dann nicht forminvariant bei räumlichen Drehungen ist),

$\Rightarrow \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix}$ ist ein n -komponentiger Spaltenvektor.

Forderungen an die Gleichung:

- (1) Die Komponenten $\psi_1 \dots \psi_N$ von ψ müssen die LTG erfüllen, so dass ebene Wellen als Lösungen die relativistische Energie-Impuls-Beziehung $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$ erfüllen.
- (2) \exists erhaltenen Observablen, dessen nullte Komponente eine positive Dichte ist; es gilt die Kontinuitätsgl.
- (3) Die Gleichung muss Lorentz-kovariant sein:

(1), (2), (3) \Rightarrow DIRAC-Gleichung.

Konsequenzen dieser Bedingungen:

zu (1): zweifache Anwendung von \hbar ergibt

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = -\hbar^2 c^2 \sum_{i,j=1}^3 \frac{1}{2} (\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i) \partial_i \partial_j \psi$$

$$+ \frac{\hbar m c^3}{i} \sum_{i=1}^3 (\alpha^i \beta + \beta \alpha^i) \partial_i \psi + \beta^2 m^2 c^4 \psi$$

(der erste Term auf der r.H.S. wurde wg. $\partial_i \partial_j = \partial_j \partial_i$ symmetrisiert).

Divisionen: $(\hbar c)^2$ und Vergleich mit der LGE,

$$\left[\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi = 0 \text{ ergibt}$$

drei Bedingungen an die α^k, β :

$$\left. \begin{aligned} \alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i &= 2 \delta^{ij} \quad \underline{\underline{11}} \\ \alpha^i \beta + \beta \alpha^i &= 0 \\ (\alpha^i)^2 &= \beta^2 = \underline{\underline{11}} \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

Forderungen an die algebraische Struktur der DIRAC-Matrizen.

zu (2): Definiere den zu ψ adjungierten Zeilenvektor

$$\psi^+ \equiv (\psi_1^*, \dots, \psi_N^*)$$

Multipliziere die DE von links mit ψ^+

$$\Rightarrow i \hbar \psi^+ \frac{\partial}{\partial t} \psi = \frac{\hbar c}{i} \psi^+ \alpha^i \partial_i \psi + mc^2 \psi^+ \beta \psi$$

Die dazu komplex konjugierte Relation wird

$$-i \hbar \psi \frac{\partial}{\partial t} (\psi^+) = -\frac{\hbar c}{i} (\partial_i \psi^+) \alpha^{i+} \psi + mc^2 \psi \cdot \beta^+ \psi^+$$

und die Differenz beider Gleichungen $\cdot (-i \hbar)$ ergibt (mit $\frac{\partial}{\partial t} \psi^+ \psi = \psi^+ \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^+}{\partial t}$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi^+ \psi &= -c \left[(\partial_i \psi^+) \alpha^{i+} \psi + \psi^+ \alpha^i \partial_i \psi \right] + \\ &+ \frac{i mc^2}{\hbar} (\psi \beta^+ \psi^+ - \psi^+ \beta \psi) \end{aligned}$$

Damit dieser Ausdruck die Form einer Kontinuitätsgleichung erhält,

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \right]$$

, müssten die Matrizen α^k β hermitesche sein:

$$(\alpha^k)^{\dagger} = \alpha^k; \quad \beta^{\dagger} = \beta \Rightarrow \text{letzter Term fällt weg,}$$

und mit der Dirac

$$\rho \equiv \psi^{\dagger} \psi \equiv \sum_{n=1}^N \psi_n^* \psi_n, \quad \text{und die Stromdichte}$$

$$j^k \equiv c \psi^{\dagger} \alpha^k \psi$$

$j^0 \equiv c \rho$ ist die KG erfüllt; in kovarianter

Form mit

$$j^{\mu} \equiv (j^0, j^k) \quad k=1,2,3 \Rightarrow$$

$$\left[\partial_{\mu} j^{\mu} \equiv \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} j^0 + \frac{\partial}{\partial x^k} j^k = 0 \right]$$

Eigenschaften der Dirac-Matrizen:

Die Matrizen α^k, β antikommutieren:

$$\{\alpha^k, \beta\} = 0; \text{ ihr Quadrat ist } \mathbb{1} \text{ (s.o.):}$$

$$(\alpha^k)^2 = \beta^2 = \mathbb{1} \Rightarrow \text{Eigenwerte } \pm 1.$$

Schreibe diese Bedingung als

$$\alpha^k \beta^2 \equiv \alpha^k = -\beta \alpha^k \beta \quad (\alpha^k \beta = -\beta \alpha^k)$$

und benutze die zyklische Invarianz der Spur,

$$\begin{aligned} \text{Sp}(\alpha^k) &= -\text{Sp}(\beta \alpha^k \beta) = -\text{Sp}(\alpha^k \beta^2) = \\ &= -\text{Sp}(\alpha^k) = 0, \text{ und analog f\"ur } \beta \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \text{Sp}(\alpha^k) = \text{Sp}(\beta) = 0.$$

\Rightarrow Die Anzahl der positiven und negativen Eigenwerte muss gleich sein

$$\Rightarrow \boxed{N \text{ ist geradzahlig}}.$$

Ann: $N=2 \Rightarrow \#$, denn die 4 2×2 Matrizen

$\mathbb{1}, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ enthalten nur 3 antikommutierende Matrizen, wir brauchen jedoch vier.

$N=4$ ist demnach die kleinstmögliche Dimension,
in der die geforderte algebraische Struktur
realisierbar ist.

(RQM 43)

Eine spezielle Darstellung der Matrizen ist

$$\alpha^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}$$

mit den Pauli-Matrizen

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

und der Einheitsmatrix $\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Die algebraischen Beziehungen lassen sich leicht testen,
z.B. ist die zweite Bedingung

$$\alpha^k \beta + \beta \alpha^k = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ -\sigma^k & 0 \end{pmatrix} = 0.$$

Diese Darstellung ist die "Standarddarstellung" der DE.
 γ heißt "Diracspinor" oder einfache "Spinor", γ^+ der
hermitesche adjungierte Spinor. Sie haben spezifische
Transformationsigenschaften unter LT.

DE in kovarianten Form:

um zeitliche u. räumliche Ableitungen in kovarianten
Schreibweise zusammenzufassen, multiplizieren
wir zunächst die DE mit β/c und erhalten:

4.3 DE in kovarianter Form

$$+i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi - \underbrace{\left[\frac{\hbar c}{i} \alpha^k \partial_k + \beta mc^2 \right]}_{H_D} \psi = 0 \quad | \cdot \left(-\frac{\beta}{c} \right)$$

$$\left[-i\hbar \beta \partial_0 - i\hbar \beta \alpha^k \partial_k + mc \right] \psi = 0$$

definiere neue DIRAC-Matrizen

$$\gamma^0 \equiv \beta, \quad \gamma^k \equiv \beta \alpha^k$$

mit den folgenden Eigenschaften

(1) γ^0 hermitesch, $\gamma^0 = (\gamma^0)^\dagger$

$$(\gamma^0)^2 = \mathbb{1}$$

(2) γ^k antihermitesch, $(\gamma^k)^\dagger = -\gamma^k$; $(\gamma^k)^2 = -\mathbb{1}$

(Beweis: $(\gamma^k)^\dagger = (\beta \alpha^k)^\dagger = \alpha^k \beta = -\beta \alpha^k = -\gamma^k \checkmark$

$$(\gamma^k)^2 = \underbrace{\beta \alpha^k \cdot \beta \alpha^k}_{-\beta \alpha^k} = -\mathbb{1} \checkmark)$$

Diese Relationen ergeben zusammen mit den folgenden Antikommutatorrelationen ($k=1,2,3$)

$$\{\gamma^0, \gamma^k\} \equiv \gamma^0 \gamma^k + \gamma^k \gamma^0 = \beta \beta \alpha^k + \underbrace{\beta \alpha^k \beta}_{-\beta \alpha^k} = 0$$

$$\{\gamma^k, \gamma^l\} \equiv \gamma^k \gamma^l + \gamma^l \gamma^k = \underbrace{\beta \alpha^k \beta \alpha^l}_{-\alpha^k \alpha^l} + \underbrace{\beta \alpha^l \beta \alpha^k}_{-\alpha^l \alpha^k} = 0, \quad k \neq l$$
$$= -\alpha^k \alpha^l \quad = -2, \quad k=l$$

⇒ die grundlegende algebraische Struktur der DIRAC Matrizen:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} \equiv \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}$$

$(\gamma^\mu)^2 = g^{\mu\mu}$
["Clifford-Algebra"]

und die DIRAC Gleichung erhält die Gestalt

$$(-i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu + mc) \psi = 0$$

$$\left(-i\gamma^\mu \partial_\mu + \frac{mc}{\hbar}\right) \psi = 0$$

DIRAC-Gleichung, DE

R. Feynman hat folgende abkürzende Schreibweise eingeführt:

$$\not{x} \equiv \gamma \cdot v \equiv \gamma^\mu v_\mu = \gamma_\mu v^\mu = \gamma^0 v^0 - \vec{\gamma} \cdot \vec{v} \quad (\gamma_\mu = g_{\mu\nu} \gamma^\nu)$$

($v^\mu \hat{=}$ beliebiger Vektor; slash / $\hat{=}$ skalare Multiplikation mit γ_μ)

Demit wird die freie DIRAC-Gleichung

$$\left[-i\not{x} + \frac{mc}{\hbar}\right] \psi = 0$$

mit den γ -Matrizen in der oben angegebenen speziellen Darstellung ("Dirac-Darstellung")

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \quad ; \quad \gamma^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ -\sigma^k & 0 \end{pmatrix}$$

Eine dazu äquivalente Darstellung ergibt sich durch

$$\gamma \rightarrow M \gamma M^{-1}$$

mit einer beliebigen invertierbaren Matrix M . (Andere gebräuchliche Darstellungen: Majorana-, chiral Darstellung, Dirac)

4.4 Lösungen der freien DE

Die Lösungen zu definiertem Impuls \vec{p} sind

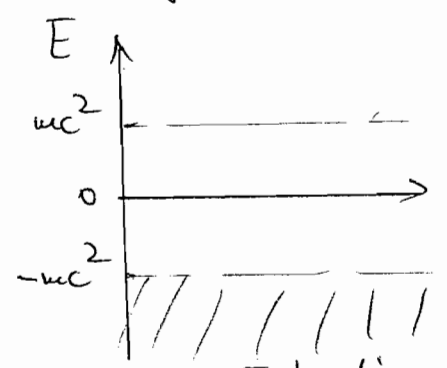
$$\psi_{p,1,2}^{(+)}(x) = e^{-i(c p_0 \pm \vec{p} \cdot \vec{x}) / \hbar} \begin{pmatrix} \chi_{1,2}^{(+)} \\ \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{p_0 + mc} \chi_{1,2}^{(+)} \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} (\text{pos.} \\ \text{Energie}) \\ \chi_{1,2}^{(\pm)}: \text{wobei} \\ \text{zu wählende} \\ \text{2komp. Spinoren} \end{matrix}$$

$$\psi_{p,1,2}^{(-)}(x) = e^{+i(c p_0 \pm \vec{p} \cdot \vec{x}) / \hbar} \begin{pmatrix} \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{p_0 + mc} \chi_{1,2}^{(-)} \\ \chi_{1,2}^{(-)} \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} (\text{neg.} \\ \text{Energie}) \end{matrix}$$

mit $p_0 = +\sqrt{\vec{p}^2 + m^2 c^2} > 0$: $E^2 = c^2 p_0^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4$,
 relativist. Energie-Impuls-Beziehung

wobei $\chi_{1,2}^{(\pm)}$ jeweils zwei linear unabhängige zweikomponentige konstante Spinoren bezeichnen.

Wie bei der LGE gibt es zwei Sorten von Lösungen, die einer mit positiver Energie $E = +c p_0$, für die sich alle Interpretationen als Teilchenwellenfunktion anbieten, und eine andere mit negativer Energie $E = -c p_0$; dazwischen liegt das „verbotene“ Energieintervall $[-m \cdot c^2 \dots m \cdot c^2]$.



neg. E-Kontinuum:
 Löser $\hat{=}$ Antiteilchen.

(Zur phys. Interpretation der ^{Lösungen zu} negativen Energien und dem Zusammenhang zu Antiteilchen \rightarrow auch Erleichterung)

\Rightarrow Asymmetrie zwischen Lösungen zu positiver und negativer Energie, die erst in der QFT aufgeklart wird. Die DE ist dort eine Gleichung für Feldoperatoren; Teilchen u. Antiteilchen werden symmetrisch behandelt.

Die positiven und negativen Lösungen sind aufgrund der Freiheit bei der Wahl der Spinoren $\chi_{1,2}^{(\pm)}$ noch nicht eindeutig spezifiziert, so dass wir neben dem Dirac-Hamiltonoperator H_D und dem Impulsoperator \vec{p} einen weiteren Operator erwarten, der nur auf die inneren Freiheitsgrade der Wellenfunktionen wirkt, und zusammen mit H_D und \vec{p} einen vollständigen Satz kommutierender Observablen bildet. Dieser Operator hängt mit dem Spin zusammen, dessen Quantenzahl den Wert $\frac{1}{2}$ hat (s. später); die DE ist deshalb für die Beschreibung von Spin- $\frac{1}{2}$ -Fermionen geeignet.

Für ein freies ruhendes Teilchen mit Wellenzahl $k=0$, Impuls $\vec{p}=0$ ist die DE

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \beta mc^2 \psi}$$

mit den Lösungen zu pers./weg-Energien $E = \pm mc^2$,

$$\psi_1^{(+)} = e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_2^{(+)} = e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\psi_1^{(-)} = e^{+\frac{imc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_2^{(-)} = e^{+\frac{imc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

4.5 Kopplung an das em. Feld

Wie in der nichtrel. Theorie wird der kanonische Impuls \vec{p} durch den kinetischen Impuls

$$\vec{\pi} = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$$

ersetzt, und das skalare elektrische Potential $e\phi$ kommt zur Ruheenergie im Dirac-Hamilton-Operator hinzu („minimale Kopplung“; „LGE“)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[c \alpha \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \beta mc^2 + e\phi \right] \psi$$

mit der Ladung e des Teilchens mit Masse m ,
beim Elektron also $e = -e_0$.

Das Hamiltonoperator mit Feld ist nach wie vor

hermitesch. Analog zum Klein-Gordon Fall

ist die Gleichung unter der lokalen Eichtransformation

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t}$$

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} \chi$$

bzw. $A^\mu \rightarrow A'^\mu = A^\mu - \partial^\mu \chi$ invariant, wenn

gleichzeitig die Wellenfunktion ψ mit einer entsprechenden Phase multipliziert wird:

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{i\Lambda(x)} \psi$$

$$\Lambda(x) = \frac{e}{\hbar c} \chi(x)$$

($\chi(x)$ eine beliebige reelle skalare Funktion der Raumzeit-Koordinaten).

Nichtrelativistischer Grenzfall

Verwende die explizite Darstellung der Dirac-Matrizen

$$\alpha^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

und zerlege den 4er Spinor ψ in zwei zweikomponentige Spaltenvektoren,

$$\psi = \begin{pmatrix} \bar{\varphi} \\ \chi \end{pmatrix}; \quad \alpha \cdot \vec{\pi} \begin{pmatrix} \bar{\varphi} \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{\pi} \cdot \vec{\sigma} \bar{\chi} \\ \vec{\pi} \cdot \vec{\sigma} \varphi \end{pmatrix} \quad \text{wg. } \alpha^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{\sigma} = (\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3)$$

\Rightarrow DE:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \bar{\varphi} \\ \chi \end{pmatrix} = c \cdot \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \bar{\chi} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \varphi \end{pmatrix} + e\phi \begin{pmatrix} \bar{\varphi} \\ \chi \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \bar{\varphi} \\ -\chi \end{pmatrix}$$

Im nichtrelativistischen Grenzfall ist die Ruheenergie mc^2 die grösste Energie im Problem; wir zerlegen deshalb in der Lösung zu positiver Energie

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

Hier variieren $\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ nur langsam und gemäss exakt der Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \chi \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \varphi \end{pmatrix} + e\phi \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} - 2mc^2 \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$$

(Bew: die Zeitableitung auf das $e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t}$ ergibt einen Term $i\hbar \cdot \frac{-imc^2}{\hbar} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = +mc^2 \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$; $-mc^2 \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \varphi \\ -\chi \end{pmatrix} =$

In der "unbaren" Gleichung vernachlässigen wir χ und $e\phi\chi$ gegenüber $2mc^2\chi$.

Ausatz:
$$\chi = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}}{2mc} \varphi$$

⇒ Im nichtrel. Grenzfall ist χ gegenüber φ um einen Faktor der Größenordnung $\sim \frac{v}{c}$ kleiner; φ ist die "große", χ die "kleine" Komponente des Spinors; sie wird im nr. Grenzfall vernachlässigt.

Ausatz in "erste" DGL einsetzen; ^(für φ) der Massenterm fällt weg:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi = \left[\frac{1}{2m} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}) + e\phi \right] \varphi$$

$$\vec{\pi} = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} = -i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A}$$

und es ist

$$\sigma^i \sigma^j = \delta_{ij} + i \epsilon^{ijk} \sigma^k$$

(prüfen durch Nachrechnen; $\epsilon^{ijk} = \begin{cases} 1, & \text{gerade Permut.} \\ -1, & \text{ungerad Permut. v. 1,2,3} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$)

$$\epsilon^{ijk} (a_j b^k - b^k a_j) = (\vec{a} \times \vec{b})_i$$

$$\Rightarrow \vec{\sigma} \cdot \vec{a} \cdot \vec{\sigma} \cdot \vec{b} = \vec{a} \cdot \vec{b} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$$

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

$$= \vec{\pi}^2 - \frac{e\hbar}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \quad (\text{mit } \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A})$$

$$\begin{aligned} [\vec{\pi} \times \vec{\pi}] &= (-i\hbar) \left(-\frac{e}{c}\right) (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \\ &= i \frac{e\hbar}{c} \vec{B} \end{aligned}$$

damit

$$\left(\vec{\pi} \times \vec{\pi} \right)^i = -i\hbar \left(\frac{-e}{c} \right) \epsilon^{ijk} (\partial_j A^k - A^k \partial_j)$$

$$\vec{\pi} = -i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} = i \frac{\hbar e}{c} \epsilon^{ijk} (\partial_j A^k - A^k \partial_j)$$

mit $\boxed{B^i = \epsilon^{ijk} (\partial_j A^k - A^k \partial_j)} \hat{=} \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$

\Rightarrow DE mit em. Feldern nichtrel. Grenzfall ("große" Komponente)

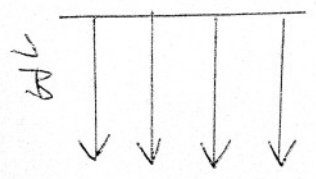
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + e\phi \right] \psi$$

Dies Resultat entspricht der Pauli-Gleichung der nichtrel. QM für den "Pauli-Spinor" ψ , dessen beide Komponenten den Spin der Elektron beschreiben.

Auch hier (bis auf QED-Korrekturen) richtige gyromagnetische Faktor $g=2$ kommt heraus.

Zum Beweis wiederhole die aus der nichtrelativistischen QM bekannten Schritte:

gegeben sei ein homogenes Magnetfeld \vec{B} mit Vektorpotential \vec{A} :



$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad ; \quad \vec{A} = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{r})$$

$$\Rightarrow \vec{\nabla} \times \vec{A} = \frac{1}{2} \vec{\nabla} \times (\vec{B} \times \vec{r}) = \frac{1}{2} \vec{B} (\vec{\nabla} \cdot \vec{r}) - \frac{1}{2} \vec{r} \vec{\nabla} \cdot \vec{B}$$

$$\text{wg. } \vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = \vec{b} (\vec{a} \cdot \vec{c}) - \vec{c} (\vec{a} \cdot \vec{b}) \quad \left(= \vec{B} = 0 \right) \quad \checkmark$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{r} = \frac{\partial x}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial y} = 2$$

Bahndrehimpuls und Spin

$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ Bahndrehimpuls

$\vec{S} = \frac{1}{2} \hbar \vec{\sigma}$

$\frac{1}{2m} \left(\vec{p}^2 + \frac{e^2}{c^2} \vec{A}^2 - \frac{2e}{c} \vec{p} \cdot \vec{A} \right) - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} =$

$$\left[\begin{aligned} \text{I: } -2\vec{p} \cdot \vec{A} &= -2 \frac{1}{2} \vec{p} \cdot (\vec{B} \times \vec{r}) = -\vec{L} \cdot \vec{B} \\ [\vec{a}(\vec{b} \times \vec{c})] &= \vec{b}(\vec{c} \times \vec{a}) \\ \Rightarrow \vec{p}(\vec{B} \times \vec{r}) &= \vec{B}(\vec{r} \times \vec{p}) = \vec{B} \cdot \vec{L} \end{aligned} \right] \left[\vec{\sigma} \cdot \vec{B} = \frac{2\vec{S}}{\hbar} \cdot \vec{B} \right]$$

$= \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 - \frac{e}{2mc} (\vec{L} \cdot \vec{B} + 2\vec{S} \cdot \vec{B})$

NR Näherung der Dirac-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[\frac{\vec{p}^2}{2m} - \underbrace{\frac{e}{2mc} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B}}_{\downarrow} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + e\phi \right] \psi$$

$\equiv \vec{\mu}$, magnetisches Moment aus Bahn- und Spinanteil.

$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = [H_0 + H_{int}] \psi$

$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m}$

$$H_{int} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + e\phi$$

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_{\text{Bahn}} + \vec{\mu}_{\text{Spin}} = \frac{e}{2mc} (\vec{L} + 2\vec{S})$$

Das Spin-Moment ist demnach

$$\vec{\mu}_{\text{Spin}} = \frac{e}{2mc} \cdot 2\vec{S} \equiv g \cdot \frac{e}{2mc} \vec{S}$$

mit dem Landé-Faktor (gyromagnetischen Faktor)

$g_e = 2$: bestimmt um wieviel stärker sich der Spin auf die Teilchenenergie auswirkt als ein gleich großer (Im Rahmen der Quantenelektrodynamik) Bahndrehimpuls

werden Korrekturterme abgeleitet: $g_e^{th} = 2.0023193048(8)$

Mit dem Bohrschen Magneton (Bohag) $g_e^{ex} = 2.002319304362$ (22)

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} (\approx 5.788 \cdot 10^{-11} \text{ MeV} \cdot \text{T}^{-1}) ; \frac{e}{2mc} \equiv -\frac{\mu_B}{\hbar}$$

lässt sich das magnetische Spin-Moment der Elektronen ($m \equiv m_e$) schreiben als $e \equiv -1 \text{ elektr. Elementarladung (Vorzeichen!)} \equiv -e_0$

$$\vec{\mu}_{\text{Spin}} = -g_e \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}$$

Für ein Coulombpotential $e\phi = -\frac{ze_0^2}{r}$ ist das Zeitverhalten der Lösung ψ durch die Rydberg-Energie charakterisiert, $Ry = \frac{mc^2 \alpha^2}{2} \rightarrow 13.6 \text{ eV}$ für $z=1$ ($\alpha = \frac{v}{c}$)

Bei kleinem z (insbesondere H-Atom mit $z=1$) ist die Ruheenergie der Elektronen sehr viel größer als diese Energie, $511 \text{ keV} \gg 13.6 \text{ eV}$, so dass die Vernachlässigung von χ in der Bewegungsgleichung gerechtfertigt ist.

Ankopplung an das em. Feld in kovarianter Form: analog zu LGE

$$DE \quad [-i\gamma^\mu \partial_\mu + \frac{mc}{\hbar}] \psi = 0$$

$$[-i\not{\partial} + \frac{mc}{\hbar}] \psi = 0$$

Impulsoperatoren in kovarianter Notation

$$p_\mu = i\hbar \partial_\mu, \quad \partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} \quad \text{kovariant}$$

$$p^\mu = i\hbar \partial^\mu, \quad \partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu} \quad \text{kontravariant}$$

zeitl. und räuml. Komponenten:

$$p^0 = p_0 = i\hbar \frac{\partial}{\partial ct}; \quad p^1 = -p_1 = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x^1} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^1}$$

Minimale Kopplung an das em. Feld durch

$$p_\mu \rightarrow p_\mu - \frac{e}{c} A_\mu, \quad A^\mu = (A^0, \vec{A}), \quad A^0 = c\phi$$

(d.h. die Ableitungen werden ersetzt durch "Ableitung - Vektorpotential")

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} - \frac{e}{c} A_\mu$$

(entspricht $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\phi$)

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^i} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^i} + \frac{e}{c} A_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^i} - \frac{e}{c} A^i$$

$$\Rightarrow \boxed{[-\gamma^\mu (i\hbar \partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu) + mc] \psi = 0}$$

Relativistische kovariante Form der DE weiter

Kontinuitätsgleichung mit em. Feld

Aufgrund der Hermitizität des Hamilton-Operators ermöglicht die DE - im Lagrange zu LGE - die Definition einer positiv definiten Wahrscheinlichkeitsdichte.

Beweis: DE

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial t} = \left[c \vec{\alpha} (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}) + e\phi + \beta mc^2 \right] \psi(x)$$

$$\psi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*) \cdot \quad , \quad \text{Multiplikation mit } \psi^\dagger$$

$$\Rightarrow i\hbar \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i} \psi^\dagger \vec{\alpha} \vec{\nabla} \psi - e \psi^\dagger \vec{\alpha} \vec{A} \psi + e \phi \psi^\dagger \psi + mc^2 \psi^\dagger \beta \psi$$

Adjunktion der DE (mit $\alpha = \alpha^\dagger, \beta = \beta^\dagger$) und ausschließende Multiplikation von rechts mit ψ ergibt

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar c}{i} (\vec{\nabla} \psi^\dagger) \vec{\alpha} \psi - e \psi^\dagger \vec{\alpha} \vec{A} \psi + e \phi \psi^\dagger \psi + mc^2 \psi^\dagger \beta \psi$$

Subtraktion dieser beiden Gleichungen ergibt eine Kontinuitätsgleichung der Form (die Terme mit \vec{A}, ϕ, m haben sich weg):

$$\boxed{\frac{\partial \rho(x)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(x) = 0} \quad \text{mit } \rho = \psi^\dagger \psi, \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} \psi$$
$$\vec{j} = \psi^\dagger c \vec{\alpha} \psi$$

Wendet man hierauf den Poynting'schen Satz an, ergibt sich

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3x \rho = - \int d^3x \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = \oint dF \vec{j} = 0:$$

die Gesamtwahrscheinlichkeit ist zeitlich konstant, $\int d^3x \rho(x) = \text{const.}$

Dies rechtfertigt zusammen mit

$$\psi^\dagger \psi = \sum_{\mu} \psi_{\mu}^* \psi_{\mu} = \sum_{\mu} |\psi_{\mu}|^2 \geq 0$$

die Interpretation von ρ als positive definite Wahrscheinlichkeitsdichte, und dementsprechend \vec{j} als Wahrscheinlichkeitsstromdichte.

Ferner kann das in der nichtrelativistischen QM eingeführte Skalarprodukt (in der Ortsdarstellung) übernommen werden:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int d^3x \psi^\dagger(x) \phi(x)$$

mit den Konsequenzen

- Orthogonalität der Eigenzustände ψ eines hermiteschen Operators mit verschiedenen Eigenwerten
- Darstellungsunabhängigkeit des Skalarproduktes unter unitären Transformationen:

Im Gegensatz zum nichthermiteschen Klein-Gordon-Fall ist im hermiteschen DIRAC-Fall keine Modifikation des in der nichtrelativistischen Theorie gebräuchlichen

Begriffe "Skalarprodukt", "Hermitizität", und

"Unitarität" erforderlich.

(In der Klein-Gordon Theorie lässt sich ein "verallgemeinertes Skalarprodukt" definieren:

$$\langle \psi | \phi \rangle_V \equiv \int d^3x \psi^\dagger(x) \sigma_3 \phi(x)$$

5. Invarianzen der Dirac-Gleichung

5.1 Lorentz-Kovarianz

Die Lorentz-Kovarianz wurde bereits bei der Ableitung des $\mathcal{D}\mathcal{E}$ gefordert, dh. sie ist in der Form des $\mathcal{D}\mathcal{E}$ berücksichtigt. Wegen der prinzipiellen Bedeutung soll sie dennoch erneut diskutiert werden.

Inertialsysteme sind Bezugssysteme, in denen sich Teilchen kraftfrei bewegen.

Die Lorentz-Transformationen (LT) geben an, wie sich die Koordinaten zweier Inertialsysteme ineinander transformieren. Bei gleichförmiger Bewegung hängen die Koordinaten durch eine lineare Transformation miteinander zusammen.

Die inhomogenen LT (\equiv Poincaré-Transformationen) haben die Gestalt

$$x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu} + a^{\mu}$$

$$x' = \Lambda x + a$$

$$x = \Lambda^{-1}(x' - a)$$

mit reellen Λ^{μ}_{ν} , a^{μ} .

Linearität: Die Parabelgleichung in Parameterdarstellung,

$x^\mu = e^\mu \cdot s + d^\mu$ wird durch eine solche ("affine") Transformation wieder in eine Parabelgleichung überführt.

Relativitätsprinzip: Die Naturgesetze sind in allen Inertialsystemen gleich: Es gibt kein ausgezeichnetes, "absolutes" Bezugssystem.

Aus der Forderung der Invarianz des d'Alembert-Operators,

$$\square = \partial_\mu \partial^\mu = g_{\mu\nu} \partial^\mu \partial^\nu = \partial_\mu g^{\mu\nu} \partial_\nu$$

ergibt sich

$$\Lambda^\lambda_\mu g^{\mu\nu} \Lambda^\rho_\nu = g^{\lambda\rho}, \text{ oder in Matrixform}$$

$\Lambda g \Lambda^T = g$ dies definiert die LT.

Beweis: $\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{\partial x'^\lambda}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x'^\lambda} = \Lambda^\lambda_\mu \partial'_\lambda$

$$\partial_\mu \partial^\mu \equiv \partial_\mu g^{\mu\nu} \partial_\nu = \Lambda^\lambda_\mu \partial'_\lambda g^{\mu\nu} \Lambda^\rho_\nu \partial'_\rho \stackrel{!}{=} \partial'_\lambda g^{\lambda\rho} \partial'_\rho$$

$$\Rightarrow \Lambda^\lambda_\mu g^{\mu\nu} \Lambda^\rho_\nu = g^{\lambda\rho}$$

$$\stackrel{\wedge}{=} \Lambda g \Lambda^T = g \quad \checkmark$$

Poincaré-Gruppe \equiv { inhomogene Lorentz-Transformation, $a^\mu \neq 0$ }

Die Gruppe der homogenen LT enthält alle Elemente mit $a^\mu = 0$.

Inhomogene LT werden durch (Λ, a) charakterisiert, z.B.

Translationsgruppe $(\Lambda, a) = (\mathbb{1}, a)$

Drehgruppe $(\Lambda, a) = (\mathbb{D}, 0)$

Die γ -Matrizen ändern sich nicht bei LT.

Eigentliche LT: Ausschluss von Raumzeit-Translationen, Raumreflexion, Zeitspiegelung

Spezielle eigentliche LT: Ausschluss von 3d-Rotationen (wie bei der Transformation Laborsystem \leftrightarrow Schwerpunktsystem)

Aus der Forderung der Invarianz des d'Alembert Operators folgt

$$(\det \Lambda)^2 = 1 \Rightarrow \det \Lambda = \pm 1$$

Aus dem ME $\lambda=0, \rho=0$ der Definitivgleichung folgt

$$\Lambda^0_\mu g^{\mu\nu} \Lambda^0_\nu = 1 = (\Lambda^0_0)^2 - \sum_k (\Lambda^0_k)^2 = 1$$

$$\Rightarrow \Lambda^0_0 \geq 1 \text{ oder } \Lambda^0_0 \leq -1$$

Das Vorzeichen der Determinante von Λ und das Vorzeichen von Λ^0_0 werden zur Klassifizierung der Elemente der Lorentz-Gruppe \mathcal{L} verwendet:

Gruppe \mathcal{L} verwendet:		<u>sgn Λ^0_0</u>	<u>det Λ</u>
eigentliche orthochron	\mathcal{L}_+^\uparrow	1	+1
uneigentliche	\mathcal{L}_+^\downarrow	1	-1
zeitspiegelungstauglich	\mathcal{L}_-^\uparrow	-1	-1
	\mathcal{L}_-^\downarrow	-1	+1

5.2 Paritätstransformation P

RQH 61

Übergang von einem räumlichen kartesischen Recht-
zu einem Linkssystem:

$$P: t \rightarrow t' = t$$

$$\vec{x} \rightarrow \vec{x}' = -\vec{x}$$

(Raumspiegelung: recht \rightarrow links
oben \rightarrow unten)

Ist die DE

$$\left[-i\gamma^\mu \partial_\mu + \frac{mc}{\hbar} \right] \psi = 0$$

invariant unter dieser Transformation?

Ausatz für den Dirac-Spinor im gestrichenen System:

$$\psi'(\vec{x}', t') = S(P) \psi(\vec{x}, t)$$

können wir $S(P)$ so wählen, dass für ψ' die DE gilt?

(ist $t' \equiv t \equiv c \equiv 1$)

$$\left[-i\gamma^\mu \partial'_\mu + m \right] \psi'(\vec{x}', t') = 0$$

$$= \psi'(\vec{x}', t')$$

$$S^{-1}(P) \left[-i\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} - i\gamma^j \frac{\partial}{\partial x^j} + m \right] S(P) \psi(\vec{x}, t) = 0$$

$$\stackrel{\substack{\vec{x}' = -\vec{x} \\ \Rightarrow}}{S^{-1}(P)} \left[-i\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} + i\gamma^j \frac{\partial}{\partial x^j} + m \right] S(P) \psi(\vec{x}, t) = 0$$

Die letzte Gleichung reduziert sich auf die DE
für $\psi(\vec{x}, t)$, falls

$$S^{-1}(P) \gamma^0 S(P) = \gamma^0$$

$$S^{-1}(P) \gamma^j S(P) = -\gamma^j$$

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}$$

$$\gamma^j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^j \\ \sigma^j & 0 \end{pmatrix}$$

Das lässt sich erreichen durch die Wahl

$$\boxed{S(P) \equiv \gamma^0}, \text{ denn } (\gamma^0)^{-1} \gamma^0 \gamma^0 = \gamma^0$$

$$\begin{aligned} (\gamma^0)^{-1} \gamma^i \gamma^0 &= -(\gamma^0)^{-1} \gamma^0 \gamma^i \\ &= -\gamma^i \end{aligned}$$

und der paritätstransformierte

Dirac-Spinor ist

$$\boxed{\psi'(\vec{x}', t') = \gamma^0 \psi(\vec{x}, t) = \gamma^0 \psi(-\vec{x}', t')}$$

$\psi'(\vec{x}, t)$ erfüllt dieselbe Bewegungsgleichung und auch dieselben Antivertauschungsregeln wie $\psi(\vec{x}, t)$.

Mit dem Dirac-adjungierten Spinor

$$\boxed{\bar{\psi}(x) \equiv \psi^\dagger(x) \cdot \gamma^0} \quad (\psi^\dagger \equiv \text{hermitesche konjugierter Spinor})$$

sind dies bei Ersetzung der Spinoren durch Feldoperatoren

$$\{\psi(\vec{x}, t), \psi(\vec{y}, t)\} = \{\bar{\psi}(\vec{x}, t), \bar{\psi}(\vec{y}, t)\} = 0$$

$$\{\psi(\vec{x}, t), \bar{\psi}(\vec{y}, t)\} = \gamma^0 \delta^3(\vec{x} - \vec{y})$$

und für ψ' genauso.

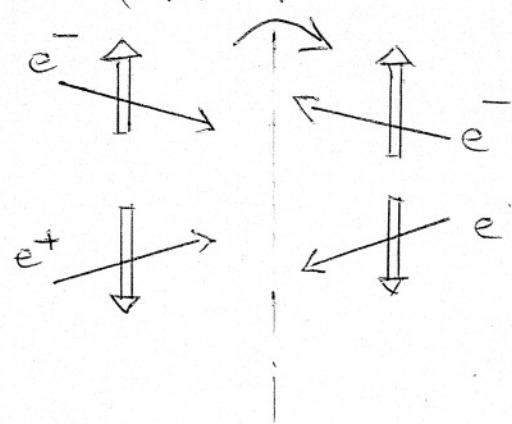
Die Spinoren $\psi(\vec{x}, t)$ und $\psi'(\vec{x}, t)$ sind äquivalent, d.h. sie gehen durch eine unitäre Transformation $U(P)$ im Zustandsraum aneinander hervor:

$$\boxed{U(P) \psi(\vec{x}, t) U^{-1}(P) = \psi'(\vec{x}, t) = \gamma^0 (\psi(\vec{x}, t))}$$

Für Ein-Teilchen-Zustände ist mit $P = \begin{pmatrix} P_0 \\ \vec{P} \end{pmatrix}$:

$$U(P) |e^-(\vec{p}, s)\rangle = |e^-(-\vec{p}, s)\rangle$$

$$U(P) |e^+(\vec{p}, s)\rangle = -|e^+(-\vec{p}, s)\rangle$$



wenn die Bedingung für den unitären Operator U im Raum der Elektron-Positron Zustände ist

$$U(P) a_s^+(\vec{p}) U^{-1}(P) = a_s^+(-\vec{p})$$

↑ Erzeugungsoperator für ein Elektron mit Spin s und Impuls \vec{p}

$$U(P) b_s^+(\vec{p}) U^{-1}(P) = -b_s^+(-\vec{p})$$

↑ Erzeugungsoperator für ein Positron mit Spin s und Impuls \vec{p} .

dh. nach der Dirac-Theorie haben Elektron und Positron negative Parität relativ zueinander. Das lässt sich experimentell verifizieren beim Zerfall von Positronium, dem wasserstoff-ähnlichen Bindungszustand von e^+ und e^- , in zwei Photonen, durch Messen der Winkelverteilungen

(Der Singlett-Zustand - antiparallele Spins $S=0, M_S=0$ - heißt Para-Positronium $p-Ps, ^1S_0$, hat eine mittlere Lebensdauer von $\tau \approx 125 \text{ ps}$ und zerfällt in zwei Gammaquanten. Der Triplet-Zustand mit parallelen Spins $S=1, M_S=-1, 0, 1$ heißt Orthopositronium mit einer mittleren Lebensdauer von $\tau \approx 142 \text{ ns}$, und zerfällt i.a. in drei Photonen. Annihilation in weiteren zwei-Photonen mit einer Gesamtenergie von 1022 keV erfolgt aus dem metastabilen $2S$ -Zustand in 1.1 ps , der Zerfall in den Grundzustand ist schneller).