Relativistische Quanten-
mechanik

So Sem. 2009 HD

Georg Wolschin
Institut f. Theoretische Physik
Univ. Heidelberg

Relativistische Quantenmechanik

Sommersemester 2009 UHD

Georg Wolschin

Seite

Literatur

J.D. Bjorken, S.D. Drell: Relativistische Quantenmechanik

A. Messiah, Quantenmechanik, Band II, de Gruyter 1990

H.M. Pilkuhn, Relativistic Quantum Mechanics
Springer 2003/ 2nd ed. 2005

A. Wachter, Relativistische Quantenmechanik,
Springer 2005

C. Itzykson, J.-B. Zuber, Quantum Field Theory,
McGraw-Hill, NY 1980

O. Nachtmann, Elementarteilchenphysik, Vieweg,
Braunschweig, 1986

W. Greiner, 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
- $E_{WW} \gtrsim mc^2 \Rightarrow$ Teilchenerzeugung

} Lorentz-Invariante Theorie

$\hookrightarrow$ erfordern Feldquantisierung $\Rightarrow$ "Quantenfeldtheorie"

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.

Historisch war die erste relativistische Wellengleichung die "Klein-Gordon-Gleichung" (KGE)

E. Schrödinger, Annalen Phys. 81, 109 (1926)
W. Gordon, 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. das Elektron):

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

Wie die KGE hat die DE Lösungen mit negativer 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 des Elektrons

Dirac versuchte zunächst, die Massendifferenz e/p –
auf die Wechselwirkung mit dem See zurückzuführen.
H. Weyl zeigte jedoch, dass die Löchertheorie 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, $|\psi\rangle$
- Observable werden durch hermitesche Operatoren dargestellt
- Der Mittelwert einer Observablen im Zustand $|\psi\rangle$ beschreiben, $\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$ ("Erwartungswert")
- Bei einer Messung von A geht der ursprüngliche Zustand in den Eigenzustand $|n\rangle$ von A mit Eigenwert a_n über, $A|n\rangle = a_n|n\rangle$

Es folgt eine Einführung in die verwendete Notation,
dann untersuchen wir die Eigenschaften der Klein-Gordon
und Dirac-Gleichung mit der Interpretation als
Einteilchen-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, Energien, Impulse und Massen die Dimension einer inversen Länge; Ladungen werden dimensionslos $\left(e^2 = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq 1/137\right)$

Koordinaten:

Zeitpunkt t und ein Punkt im Ortsraum $\vec{x} = (x, y, z)$ 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 $\mu, \nu, \ldots$), 1, 2, 3 die Komponenten des gewöhnlichen Raumes (lat. Buchstaben $i, k, l \ldots$):

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

Metrischer Tensor, ko- und kontravariante Indices

Die Metrik im Raum-Zeit-Kontinuum ist durch den metrischen Tensor definiert

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

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

RQHS

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 erscheinende Indices wird summiert:

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

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

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

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

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

Dreier- und Vierervektoren, Skalarprodukt

Für Dreiervektoren im gewöhnlichen Ortsraum verwenden wir $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$, so dass

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

Skalarprodukt / Betrag 3er Vektor: $a = (\vec{a}\cdot\vec{a})^{1/2} = [a_x^2 + a_y^2 + a_z^2]^{1/2}$

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

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

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

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

Klassifizierung der 4er Vektoren

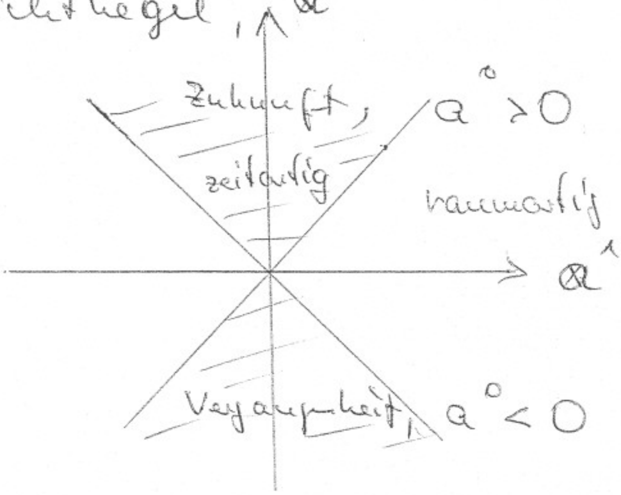
Je nach Vorzeichen ihrer Norm gibt es drei Arten von 4er Vektoren:

$a_\mu a^\mu < 0$, a^μ raumartig

$a_\mu a^\mu = 0$, a^μ Nullvektor

$a_\mu a^\mu > 0$, a^μ zeitartig

Dies entspricht der Lage des Vektors relativ zum Lichtkegel,



Gradient, Differentialoperatoren

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

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

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

$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3} \right)$$

$$\equiv \left(\frac{\partial}{\partial ct}, \vec{\nabla} \right) \qquad \text{Gradientenoperator}$$

Der entsprechende kontravariante Gradient ist

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

Der d'Alembert-Operator ist

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

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

ein in den vier Indices total antisymmetrischer Tensor:

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

Elektromagnetisches Feld

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

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

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

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

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

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

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

und

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

RQM5

Lorentz-Transformation (LT)

Beim Wechsel der Bezugssysteme 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 $\quad (\Omega^{\mu\nu} = g^{\nu\sigma} \Omega^{\mu}{}_{\sigma})$

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

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

$\Rightarrow \det |\Omega^{\mu}{}_{\nu}| = \pm 1$ (+1: „eigentliche" LT; Richtungssinn 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 Vierervektoren erhalten bleiben.

2. Verbindung zur nichtrelativistischen QM

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

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

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

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

(1) Wegen der unterschiedlichen Ordnungen der zeitlichen und räumlichen Ableitungen ist die SE nicht Lorentz-kovariant ($\hat{=}$ relativistisch invariant gegenüber LT): ihre Struktur ändert sich beim Übergang von einem Inertialsystem durch LT in ein anderes.

(2) Die SE beschreibt nicht den Eigendrehimpuls eines Teilchens, z.B. den Spin des Elektrons. 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 $\vec{\sigma}/2$ des Spins zusammen:

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

Gesamtdrehimpuls-Operator

$$\vec{L} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$$ 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:

$$\boxed{\begin{aligned} E &\to i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \\ \vec{p} &\to \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} = -i\hbar\vec{\nabla} \end{aligned}}$$

Damit ergibt sich aus der nichtrelativistischen Energie eines freien Teilchens

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

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 kontravarianten Vierervektors

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

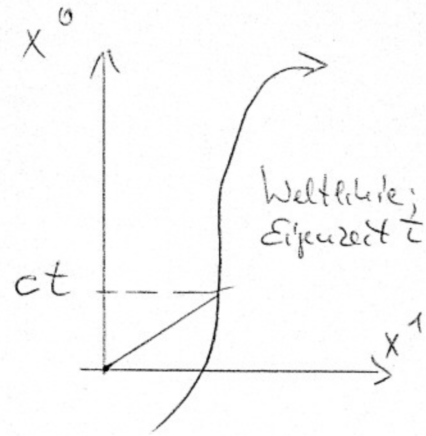
mit den kovarianten Komponenten

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

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

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

Ableitung der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung



„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

$$dx' = \begin{pmatrix} c\,d\tau \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Mit der Invarianz des relativistischen Abstandsquadrats ist

$$(dx')^2 = c^2 d\tau^2 = (dx)^2 = c^2 dt^2 - (d\vec{x})^2$$
$$= c^2 dt^2 \left(1 - \frac{v^2(t)}{c^2}\right)$$

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

Der Zusammenhang zwischen τ und t wird

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

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

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

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

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

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

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

$$\vec{p} \to m\vec{v}.$$

Das invariante Skalarprodukt für den 4er Impuls ergibt demnach

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

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

3. Klein-Gordon-Gleichung

Wenden wir das Korrespondenzprinzip

$$E \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \to -i\hbar\vec{\nabla} \quad ; \quad \underset{(\frac{E}{c}, \vec{p})}{p^\mu} \to \underset{i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla}\right)}{i\hbar\partial^\mu}$$

auf die relativistische Energie-Impuls-Beziehung an,

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

erhalten wir die Wellengleichung

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

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

Wir gehen deshalb von der quadratischen Relation aus,

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

und erhalten

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

mit jeweils 2. Ableitung in Ort und Zeit.

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

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

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

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

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

invariant gegenüber LT ist.

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

$$\frac{\hbar}{mc} \equiv \lambda\!\!\!^{-}_c \qquad [\lambda_c^e \simeq 3.86 \cdot 10^{-13}\, m]$$

Man nennt die von Schrödinger, Gordon und Klein aufgestellte Gleichung

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

freie Klein-Gordon-Gleichung, KGE

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

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

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

3.1 Eigenschaften der KGE

sie erfüllt die Kontinuitätsgleichung;

zur Herleitung aus der KGE bildet man

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

und subtrahiert die komplex konjugierte Gleichung,

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

$\Rightarrow$

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

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

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

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

Dies hat die Form einer Kontinuitätsgleichung

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

mit der Dichte

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

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

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

$$\boxed{\partial_\mu j^\mu = 0}$$

In relativistischer Formulierung ist die Normierung meist so gewählt, dass

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

so dass der Energie-Eigenzustand

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

und $|\Psi| = 1$ entspricht $2E$ Teilchen pro Einheitsvolumen

Die Verbindung zum "Schrödinger-Strom" ist dann

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

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

Als Folge der 2. Zeitableitung in der KGE 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 KGE 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 KGE

$\exists$ zwei freie Lösungen in Form von ebenen Wellen:

$$\boxed{\begin{aligned} \psi(\vec{x},t) &= e^{-i(Et - \vec{p}\vec{x})/\hbar} \\ E &= \pm\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} \end{aligned}}$$

(Prüfen durch Einsetzen)

Es treten positive und negative Energien auf, die Energie ist nicht nach unten beschränkt. Die Theorie ist skalar, sie enthält keinen Spin und könnte nur neutrale Spin 0 Mesonen (z.B. π^0) beschreiben.
Als Quantenfeldtheorie beschreibt die KGE Mesonen, das hermitesche skalare Klein-Gordon 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 die Interpretation des 4er Vektors j^μ ändert:

$j^\mu \to e\, j^\mu(x) \equiv$ Stromdichte-Vierervektor, d.h. insbesondere

$\rho \to e\, \rho(x) \equiv$ elektrische Ladungsdichte; nicht positiv definit

Die Kontinuitätsgleichung

$$\boxed{\partial_\mu j^\mu = 0}$$

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. Mit dieser Interpretation ist die KGE keine Einteilchen-Theorie mehr, sondern eine „Theorie der Ladung".

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

3.2 Wechselwirkung mit elektromagnetischen Feldern; Eichinvarianz

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

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

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

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

Damit wird die KGE mit em. Feld:

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

bzw. in kovarianter Form

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

Die Maxwellschen Gleichungen sind invariant unter lokalen Eichtransformationen der Art

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

bzw.

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

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

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

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

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

$$0 = \Big[\big(p_\mu - \frac{e}{c}A'_\mu - \frac{e}{c}\partial_\mu\chi\big)\big(p^\mu - \frac{e}{c}A'^\mu - \frac{e}{c}\partial^\mu\chi\big) - m^2c^2\Big]\cdot \underbrace{\psi}_{\psi' \cdot e^{-i\Lambda}}$$

$$= \Big[\big(p_\mu - \frac{e}{c}A'_\mu - \frac{e}{c}\partial_\mu\chi\big)e^{-i\Lambda}\big(p^\mu - \frac{e}{c}A'^\mu - \frac{e}{c}\partial^\mu\chi + \hbar\partial^\mu\Lambda\big) - m^2c^2e^{-i\Lambda}\Big]\psi'$$

$$= e^{-i\Lambda}\Big[\big(p_\mu - \frac{e}{c}A'_\mu - \frac{e}{c}\partial_\mu\chi + \hbar\partial_\mu\Lambda\big)\cdot \big(p^\mu - \frac{e}{c}A'^\mu - \frac{e}{c}\partial^\mu\chi + \hbar\partial^\mu\Lambda\big) - m^2c^2\Big]\psi'$$

$\Rightarrow$ Mit der Wahl

$\boxed{\Lambda(x) = \frac{e}{\hbar c}\chi(x)}$ geht dies in die Form der KGE über,

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

(Beweis durch Nachrechnen)

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

Kontinuitätsgleichung mit Feld:

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

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

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

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

(wieder mit dem Faktor $\frac{\hbar}{2mi}$, analog zur nichtrel. QM)

bzw. in Lorentz-kovarianter Form

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

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

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

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

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

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

Jedoch 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 definiter 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 Ersetzungen (ψ Lösung der KGE)

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

$$\Psi = \begin{pmatrix}\phi\\ \varphi\end{pmatrix}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

mit den Pauli-Matrizen

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

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

$$i\sigma_2 = -(i\sigma_2)^+$$

Für die Lösungen der freien KGE folgt

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

mit dem Lösungsansatz

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

$$\Psi_{\vec{p}}^{(1)}(x) = \begin{pmatrix}mc+p_0\\ mc-p_0\end{pmatrix} e^{-ip_\mu x^\mu/\hbar}$$

$$\Psi_{\vec{p}}^{(2)}(x) = \begin{pmatrix}mc-p_0\\ mc+p_0\end{pmatrix} e^{+ip_\mu x^\mu/\hbar}$$

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

$$\langle \Psi | \psi \rangle = \int d^3x \, \Psi^+ \psi$$

$$\langle \Psi | O | \psi \rangle = \int d^3x \, \Psi^+ O \psi \qquad (O \text{ linearer Operator})$$

$$\langle \Psi | O | \psi \rangle = \langle \psi | O | \Psi \rangle^*$$

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

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

$$\Rightarrow \; i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi | H | \Psi \rangle - \langle \Psi | H | \Psi \rangle^*$$

$$= \langle \Psi | H - H^+ | \Psi \rangle \neq 0 .$$

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

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

$$\langle \Psi | \psi \rangle = \int d^3x \, \Psi^+ \psi$$

$$\langle \Psi | O | \psi \rangle = \int d^3x \, \Psi^+ O \psi \qquad (O \text{ linearer Operator})$$

$$\langle \Psi | O | \psi \rangle = \langle \psi | O | \Psi \rangle^*$$

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

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

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi | H | \Psi \rangle - \langle \Psi | H | \Psi \rangle^*$$

$$= \langle \Psi | H - H^+ | \Psi \rangle \neq 0 .$$

Aufgrund der Nicht-Hermitezität von $H \; (\neq H^+)$ sind seine Eigenzustände i.a. nicht orthogonal, und e^{iH} 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)

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

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

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

$\Rightarrow$ zeitunabhängige KGE:

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

Für ein sphärisch symmetrisches Potential wie das Coulomb-Feld

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

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

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

$$\varphi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\, \underbrace{Y_{lm}(\vartheta,\varphi)}_{\text{Kugelfunktionen}}$$

$\Rightarrow$ Radialgleichung:

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

Betrachte zunächst den nichtrelativistischen Grenzfall:

$$E \equiv mc^2 + E' \; ; \; E' - e\phi \ll mc^2$$

$\Rightarrow$ nichtrelativistische radiale Schrödingergleichung, denn die rhs. wird

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

$$\simeq \boxed{\frac{2m}{\hbar^2}\left[E' - e\phi(r)\right]R(r)}$$

mit der nichtrelativistischen Energie E'

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

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

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

klass. "Umlaufzeit" aus der Unschärferelation

$$\Delta x \Delta p \equiv a_\pi m_\pi \frac{a_\pi}{\tau} \simeq \hbar \quad ; \quad a_\pi \simeq \frac{m_e}{m_\pi} a_B \simeq \frac{1}{273} 0.5 \cdot 10^{-10} \text{m}$$

$$\simeq 1.8 \cdot 10^{-13} \text{m} \simeq 180 \text{ fm}$$

$$\Rightarrow \tau \simeq \frac{m_\pi a_\pi^2}{\hbar}$$

$\hbar \equiv 1$: MeV.fm $\simeq 1/197.33$

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

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

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

$\Rightarrow$ Trotz der endlichen π^--Lebensdauer gibt es wohldefinierte stationäre Energiezustände.

RQM29

Das Coulombpotential des Kerns ist

$$\boxed{e\,\Phi(r) = -\frac{Ze^2}{r}}$$

und mit der Feinstrukturkonstanten

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

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

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

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

$\Rightarrow$ kompakte Form der Radialgleichung für die neue Variable ρ :

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

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

$$\rho_0 \to 2\lambda \qquad \left(\rho_0 = \sqrt{\frac{2m}{|E|}} \cdot \frac{Ze^2}{\hbar}\right)$$

$$l(l+1) \to l(l+1) - \gamma^2 \equiv l'(l'+1)$$

(l' i.a. nicht ganzzahlig)

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

Die Radialgleichung wird analog zum nichtrel. Fall gelöst:

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

$\Rightarrow$ Lösungsansatz:

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

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

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

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

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

Lösung durch Potenzreihenansatz

$w(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$. Die aus der DGL folgende Rekursionsrelation ergibt eine Funktion $w(\rho) \propto e^{2\rho}$ (s. S. 31)

Damit $R(\rho)$ normierbar bleibt, muss die Reihe abbrechen.

einsetzen

ergibt

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k \left[k(k-1)\rho^{k-1} + 2(l'+1)k\rho^{k-1} - 2k\rho^k + (\rho_0 - 2(l'+1))\rho^k \right] = 0$$

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

$$[(k+1)k + 2(l'+1)(k+1)]\, a_{k+1} + [-2k + (\rho_0 - 2(l'+1))]\, a_k = 0$$

$\Rightarrow$ Rekursionsrelation zur Berechnung von

a_{k+1} aus a_k:

$$a_{k+1} = \frac{2(k+l'+1) - \rho_0}{(k+1)(k+2l'+2)} \cdot a_k$$

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

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

Vergleich mit der Exponentialreihe

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

mit den aufeinander folgenden Koeffizienten

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

d.h. die Reihe für $w(\rho)$ verhält sich wie $\underline{e^{2\rho}}$. Damit nicht $u(\rho) \propto e^{-\rho} w(\rho) \to e^{\rho}$ für große r resultiert, (sonst ist $u(\rho)$ nicht normierbar) muss die Reihe <u>abbrechen</u>.

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

$$\boxed{\rho_0 = 2(N + l' + 1)}, \quad N = 0, 1, 2,$$

radiale Quantenzahl

mit $\rho_0 \to 2\lambda \Rightarrow$

(bis auf l' analog zum Schrödingerfall)

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

Zur Bestimmung der Energieeigenwerte eliminieren wir σ:

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

und erhalten die Energieniveaus

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

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

$\Rightarrow$ Für verschwindende Anziehung $\gamma = Z\alpha \to 0$ geht die Energie dieser Lösungen gegen die Ruheenergie,

$$\boxed{E \underset{\gamma \to 0}{\longrightarrow} mc^2},$$

Berechnung von l' aus der Definitionsgleichung

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

$$\Rightarrow \quad \ell' = -\frac{1}{2} \left(\pm\right) \sqrt{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)^2 - \gamma^2}$$ (nur "+" zulässig, damit die kinet. Energie endlich bleibt).

$$\Rightarrow \quad E_{N\ell} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{\gamma^2}{\left[N + \frac{1}{2} + \sqrt{(\ell+\frac{1}{2})^2 - \gamma^2}\right]^2}}}$$

In nichtrelativistischer Notation ist die Hauptquantenzahl

$n = N + \ell + 1$; damit wird E $\quad (n = 1, 2, \ldots$
$\ell = 0, 1, \ldots, n-1)$

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

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

Entwicklung der Energie in eine Potenzreihe ergibt

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

$$E_{n\ell} = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Ruheenergie}}}{mc^2} - \underset{\substack{\uparrow \\ \text{nichtrel.} \\ \text{Rydberg-Energie,}}}{\frac{Ry}{n^2}} - \underbrace{\frac{Ry\,\gamma^2}{n^3}\left(\frac{1}{\ell+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right)}_{\text{relativistische Korrektur}} + \mathcal{O}(Ry\,\gamma^4)$$

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

Die relativistische Korrektur hebt die Entartung in l auf:

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

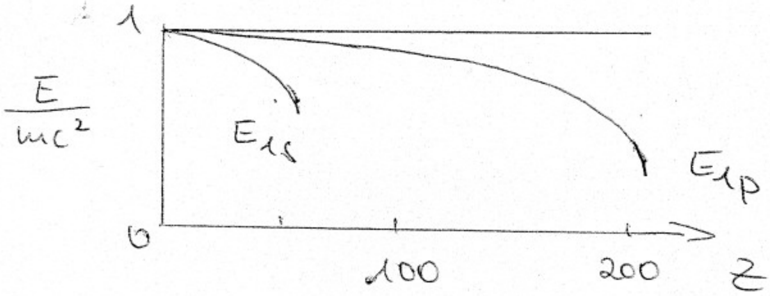
Damit l' und die Eigenwerte reell sind, muss (s. Ausdruck für l') gelten

$$\boxed{l + \frac{1}{2} > Z\alpha}$$

Für s-Zustände mit $l=0$ bedeutet das

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

für größere Z wird das System instabil, die Lösungen zum Coulomb-Potential werden für $Z>68$ unsinnig. 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 pionischen Atomen muss demnach:

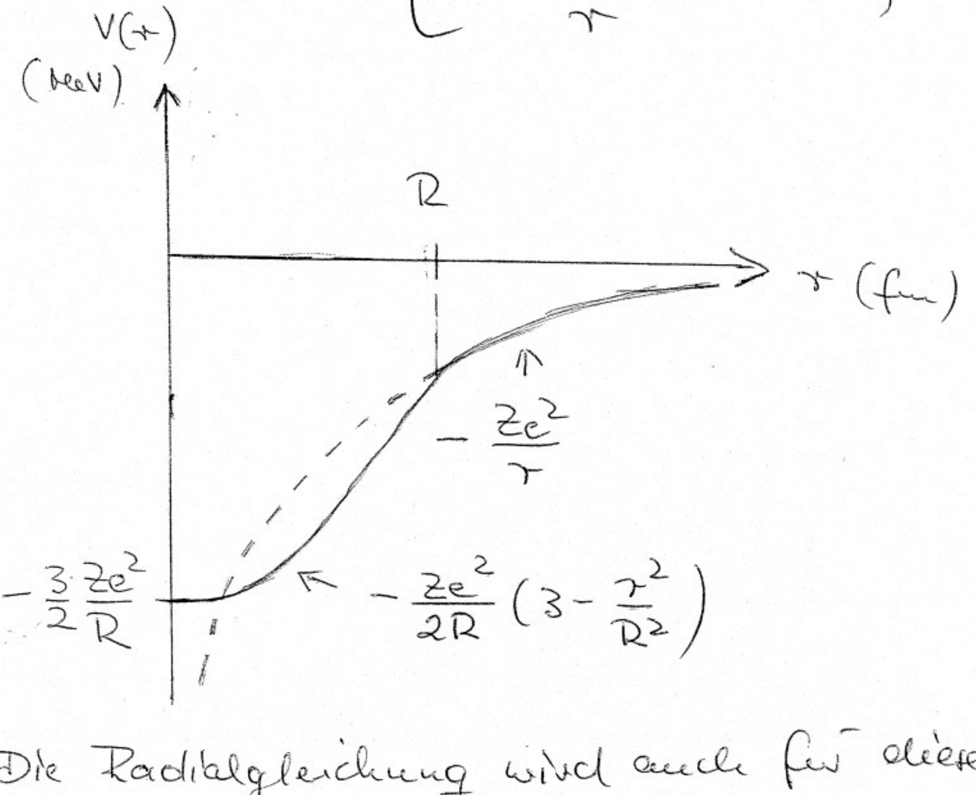
- Der endliche Kernradius berücksichtigt werden
- Die Masse m_π durch die reduzierte Masse ersetzt werden, $\mu = \frac{m_\pi M}{m_\pi + M}$
- Die Vakuumpolarisation muss berücksichtigt werden (virtuelle Elektron-Positron-Paare)
- Die starke WW Pion-Kern muss abgeschätzt werden.

3.5 Oszillator-Coulomb-Potential

Die endlichere Ausdehnung der Kerns, die auch für $Z > 68.5$ $l=0$ Bindungszustände ermöglicht, lässt sich durch ein Oszillator-Coulomb-Potential berücksichtigen.

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

$$e A^0(r) = V(r) = \begin{cases} -\dfrac{Ze^2}{2R}\left(3 - \dfrac{r^2}{R^2}\right) & ; \quad r \leq R \\[2ex] -\dfrac{Ze^2}{r} & , \quad r > R \end{cases}$$



$R \simeq 10$ fm
$Z = 82$:
$V(0) = -17.7$ MeV
$\left(\frac{82 \cdot 197}{20 \cdot 137} \cdot 1.5 \text{ MeV}\right.$

$\left(R = 1.2 A^{1/3} \text{ fm} \simeq 7.11 \text{ fm}\right)$

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

RQM36

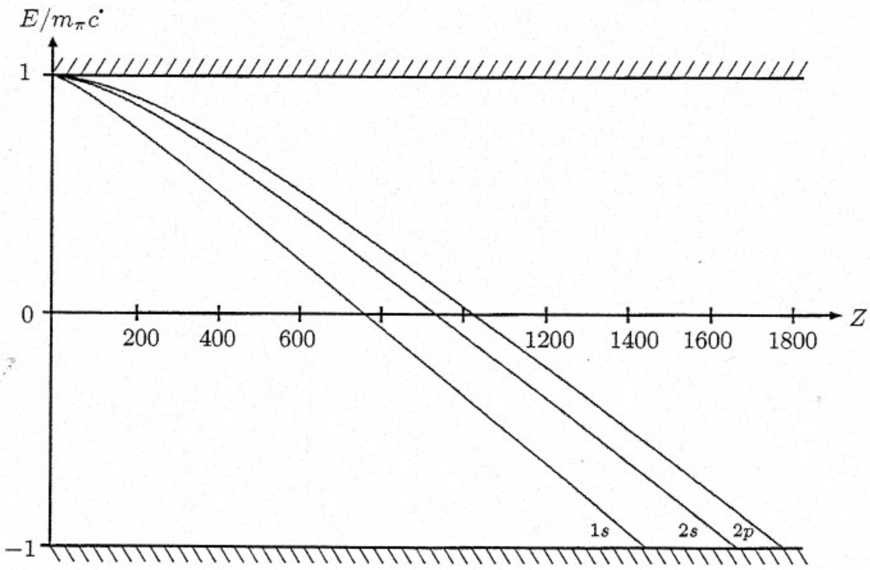


Abb. 1.10. Energiewerte gebundener $1s$-, $2s$- und $2p$-Pionzustände im Feld einer homogen geladenen Kugel (Oszillator-Coulomb-Potential) als Funktion von Z. Der Kugelradius (Kernradius) beträgt $R = 10$ fm.

verschiedene Kernladungszahlen Z der V-Erwartungswert des $1s$-Pionradius, $\langle r\rangle_{\mathrm{V}}$, das elektrostatische Oszillator-Coulomb-Potential V an der Stelle $\langle r\rangle_{\mathrm{V}}$, die Bindungsenergie $E_{\mathrm{B}} = E_{1s} - m_\pi c^2$ sowie die mittlere quadratische Abweichung $\Delta r = \sqrt{\langle r^2\rangle_{\mathrm{V}} - \langle r\rangle_{\mathrm{V}}^2}$ 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

$$Z = 2: \quad |E_{\mathrm{B}}|, |V(\langle r\rangle_{\mathrm{V}})| \ll m_\pi c^2 \;, \;\; \Delta r \gg \lambda_\pi \;.$$

⇒ Einteilchenkonzept gerechtfertigt.

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

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, bei $Z = 1450$:

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

⇒ Einteilchenkonzept nicht mehr gültig!

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

RQM37

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.

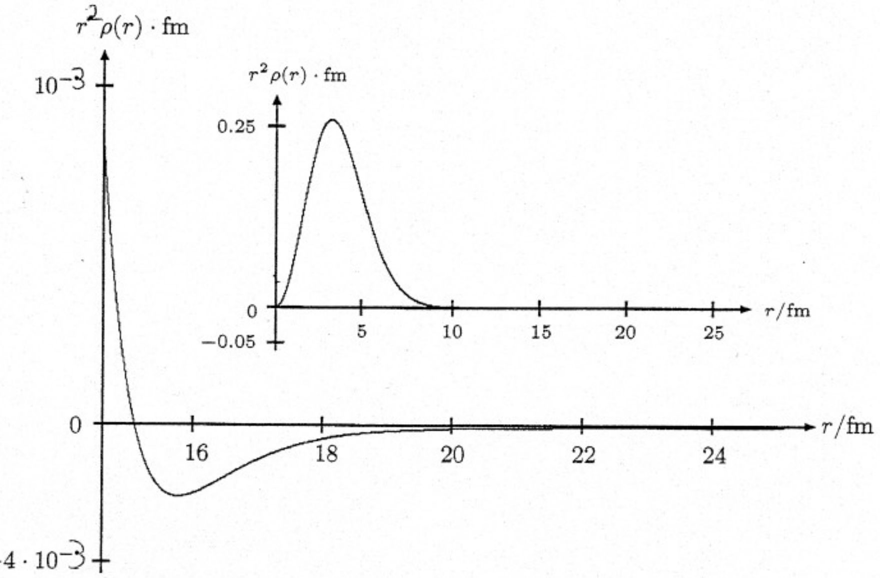


Abb. 1.11. V-normierte radiale Ladungsdichte des 1s-Pionzustandes im Oszillator-Coulomb-Potential mit $Z = 1450$ und $R = 10$ fm. Die große Grafik zeigt einen vergrößerten Ausschnitt der kleinen Grafik. Bei $r \approx 15$ fm wechselt die Ladungsdichte ihr Vorzeichen.

4. DIRAC-Gleichung (DE)

4.1 Einleitung

Um die mit der KGE verbundenen Schwierigkeiten zu vermeiden – insbesondere nicht positiv-definite Dichte –, suchte P. DIRAC nach einer in den zeitlichen und örtlichen Ableitungen linearen Gleichung:

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

mit dem DIRAC-Operator

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

der 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 die räumlichen Ableitungen nur von 1. Ordnung sein.

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

Damit H_D hermitesch ist – $H_D = H_D^+$ – müssen α^k und β hermitesche $N \times N$ Matrizen sein.

(nicht einfach Zahlen, da die Gleichung dann nicht forminvariant bei räumlichen Drehungen ist).

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

Forderungen an die Gleichung:

(1) Die Komponenten $\psi_1 \dots \psi_N$ von ψ müssen die KGE erfüllen, so dass ebene Wellen als Lösungen die relativistische Energie-Impuls-Beziehung $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$ erfüllen.

(2) $\exists$ erhaltenen Viererstrom, 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): zweimalige Anwendung von H_D ergibt

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

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

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

Division $:(\hbar^2c^2)$ und Vergleich mit der KGE,

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

drei Bedingungen an die α^k, β:

$$\left.\begin{aligned} &\alpha^i\alpha^j + \alpha^j\alpha^i = 2\delta^{ij}\,\mathbb{1} \\ &\alpha^i\beta + \beta\alpha^i = 0 \\ &(\alpha^i)^2 = \beta^2 = \mathbb{1} \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

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 $\frac{\partial}{\partial t}\psi^+\psi = \psi^+\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^+}{\partial t}$):

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi^+\psi = -c\left[(\partial_i\psi^+)\alpha^{i+}\psi + \psi^+\alpha^i\partial_i\psi\right] +$$

$$+\frac{imc^2}{\hbar}\left(\psi\beta^+\psi^+ - \psi^+\beta\psi\right)$$

Damit dieser Ausdruck die Form einer Kontinuitätsgleichung erhält,

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

, müssen die Matrizen α_i^k, β hermitesch sein:

$(\alpha^k)^+ = \alpha^k$; $\beta^+ = \beta \Rightarrow$ letzter Term fällt weg,

und mit der Dichte

$$\rho = \psi^+\psi \equiv \sum_{n=1}^{N} \psi_n^* \psi_n$$

, und der Stromdichte

$$j^k \equiv c\,\psi^+\alpha^k\psi$$

$$j^0 \equiv c\,\rho$$

ist die KG erfüllt; in kovarianter Form mit

$$j^\mu \equiv (j^0; j^k) \qquad k = 1,2,3 \Longrightarrow$$

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

Eigenschaften der Dirac-Matrizen:

Die Matrizen α^k, β antikommutieren:

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

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

Schreibe diese Bedingung als

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

und benutze die zyklische Invarianz der Spur,

$$Sp(\alpha^k) = -Sp(\beta\alpha^k\beta) = -Sp(\alpha^k\beta^2) =$$
$$= -Sp(\alpha^k) = 0, \text{ und analog für } \beta$$

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

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

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

Anm: $N = 2 \Rightarrow \#$, denn die 4 2x2 Matrizen $\mathbb{1}, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ enthalten nur 3 antikommutierende Matrizen, wir brauchen jedoch vier.

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

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, zB. 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. ψ heisst "Vierspinor" oder einfach "Spinor", ψ^+ der <u>hermitesch adjungierte</u> Spinor. Sie haben spezifische Transformationseigenschaften unter LT.

<u>DE in kovarianter Form</u>:

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

RQM41

4.3 DE in kovarianter Form

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

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

definiere neue DIRAC-Matrizen

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

mit den folgenden Eigenschaften

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

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

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

(Beweis: $(\gamma^k)^+ = (\beta\alpha^k)^+ = \alpha^k\beta = -\beta\alpha^k = -\gamma^k$ ✓

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

Diese Relationen ergeben zusammen mit den folgenden Antikommutationsrelationen

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

$$\{\gamma^k,\gamma^l\} \equiv \gamma^k\gamma^l + \gamma^l\gamma^k = \underbrace{\beta\underbrace{\alpha^k\beta}_{=-\alpha^k\underbrace{\beta\beta}_{\mathbb{1}}}}_{=-\alpha^k\alpha^l}\alpha^l + \beta\underbrace{\alpha^l\beta}\alpha^k_{=-\alpha^l\alpha_k} = 0, \quad \underline{k \neq l}$$

$\Rightarrow$ die grundlegende algebraische Struktur der DIRAC Matrizen:

$$\boxed{\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} \equiv \gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}} \quad , (\gamma^\mu)^2 = g^{\mu\mu}$$

["Clifford-Algebra"]

und die DIRAC Gleichung erhält die Gestalt

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

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

R. Feynman hat folgende abkürzende Schreibweise eingeführt:

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

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

Damit wird die freie DIRAC-Gleichung

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

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

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

Eine dazu äquivalente Darstellung ergibt sich durch

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

mit einer beliebigen nichtsingulären Matrix M. (Andere gebräuchliche Darstellungen: "Majorana"-, "chirale" Darst., s. Literatur)

4.4 Lösungen der freien DE

Die Lösungen zu definiertem Impuls $\vec{p}$ sind

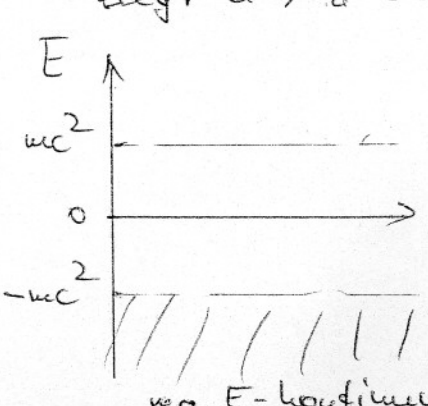
$$\psi^{(+)}_{p\,1,2}(x) = e^{-i(cp_0 - \vec{p}\vec{x})/\hbar} \begin{pmatrix} \chi^{(+)}_{1,2} \\ \frac{\vec{\sigma}\vec{p}\,\chi_{1,2}}{p_0 + mc} \end{pmatrix} \quad \text{(pos. Energie)}$$

$$\psi^{(-)}_{p\,1,2}(x) = e^{+i(cp_0 - \vec{p}\vec{x})/\hbar} \begin{pmatrix} \frac{\vec{\sigma}\vec{p}\,\chi^{(-)}_{1,2}}{p_0 + mc} \\ \chi^{(-)}_{1,2} \end{pmatrix} \quad \text{(neg. Energie)}$$

mit $p_0 = +\sqrt{\vec{p}^2 + m^2c^2} > 0$

wobei $\chi^{(\pm)}_{1,2}$ jeweils zwei linear unabhängige <u>zweikomponentige</u> konstante Spinoren bezeichnen.

Wie bei der KGE gibt es zwei Sorten von Lösungen, die einen mit positiver Energie $E = +cp_0$, für die sich die Interpretation als Teilchenwellenfunktion anbietet, und die anderen mit negativer Energie $E = -cp_0$; dazwischen liegt das „verbotene" Energieintervall $[-m\cdot c^2 \ldots m\cdot c^2]$.



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

(Zur phys. Interpretation der Lösungen zu negativen Energien und dem Zusammenhang zu Antiteilchen s. auch Einleitung).

Die positiven und negativen Lösungen sind aufgrund der Freiheiten bei der Wahl der Spinoren $\chi^{(\pm)}_{1,2}$ 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

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

mit den Lösungen zu pos./neg. Energien $E = \pm mc^2$,

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

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

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"; s. KGE)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \Big[c\,\vec{\alpha} \underbrace{\Big(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\Big)}_{\equiv \vec{\pi}} + \beta m c^2 + e\phi \Big] \psi$$

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

Der Hamiltonoperator mit Feld ist nach wie vor hermitesch. Analog zum Klein-Gordon Fall ist die Gleichung unter der lokalen Eichtransformation

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

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

bzw $A^\mu \to A'^\mu = A^\mu - \partial^\mu \chi$ invariant, wenn gleichzeitig die Wellenfunktion ψ mit einer entsprechenden Phase multipliziert wird:

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

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

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

Nichtrelativistischer Grenzfall

Verwende die explizite Darstellung der Dirac-Matrizen

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

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

$$\psi = \begin{pmatrix} \bar{\varphi} \\ \bar{\chi} \end{pmatrix} \; ; \quad \vec{\alpha} \cdot \vec{\pi} \begin{pmatrix} \bar{\varphi} \\ \bar{\chi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\, \bar{\chi} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\, \bar{\varphi} \end{pmatrix}$$

wg. $\alpha^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix}$

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

$\Rightarrow$ DE:

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

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

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

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\, \chi \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\, \varphi \end{pmatrix} + e\phi \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} - 2mc^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix}$$

(Bem.: die Zeitableitung auf der lhs ergibt einen Term
$i\hbar \cdot \frac{-imc^2}{\hbar} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = +mc^2 \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$; $-mc^2 \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \varphi \\ -\chi \end{pmatrix} =$

RQM 50

In der „unteren" Gleichung vernachlässigen wir $\hbar\dot{\chi}$ und $e\phi\chi$ gegenüber $2mc^2\chi$.

Ansatz: $$\boxed{\chi = \frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}}{2mc}\,\varphi}$$

$\Rightarrow$ 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.

Ansatz in "erste" DGL (für φ) einsetzen; 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

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

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

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

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

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

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

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

denn

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

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

$$= i\frac{\hbar e}{c}\,\varepsilon^{ijk}\left(\partial_j A^k - A^k\partial_j\right)$$

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

⇒ DE mit em. Feld im nichtrel. Grenzfall f. "große" Komponente:

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

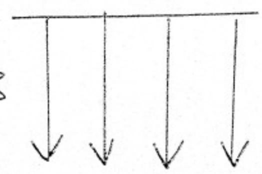
Dies Resultat entspricht der Pauli-Gleichung der nichtrel. QM für den "Pauli-Spinor" φ, dessen beide Komponenten den Spin des Elektrons beschreiben.

Auch der (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 $\vec{A}$:

$\vec{B}$



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

$$\left(\Rightarrow \vec{\nabla}\times\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{\nabla}\times(\vec{B}\times\vec{r}) = \underbrace{\frac{1}{2}\vec{B}(\vec{\nabla}\vec{r})}_{=\vec{B}} - \underbrace{\frac{1}{2}\vec{r}\vec{\nabla}\vec{B}}_{=0}\right.$$

wg. $\vec{a}\times(\vec{b}\times\vec{c}) \equiv \vec{b}(\vec{a}\vec{c}) - \vec{c}(\vec{a}\vec{b})$ ✓

$$\left.\vec{\nabla}\vec{r} = \frac{\partial x}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial y} = 2\right)$$

Bahndrehimpuls und Spin:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad \text{Bahndrehimpuls}$$
$$\vec{S} = \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}$$

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

$$\left[\begin{array}{l} \llcorner\!\lrcorner: -2\vec{p}\vec{A} = -2\frac{1}{2}\vec{p}(\vec{B}\times\vec{r}) = -\vec{L}\cdot\vec{B} \\ [\vec{a}(\vec{b}\times\vec{c}) = \vec{b}(\vec{c}\times\vec{a}) \\ \Rightarrow \vec{p}(\vec{B}\times\vec{r}) = \vec{B}(\vec{r}\times\vec{p}) = \vec{B}\cdot\vec{L} \end{array}\right] \quad \left[\vec{\sigma}\vec{B} = \frac{2\vec{S}}{\hbar}\vec{B}\right]$$

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

$\Rightarrow$ NR Näherung der Dirac-Gleichung

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

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

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi = \left[H_0 + H_{int}\right]\varphi}$$

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

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

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

Das Spin-Moment ist demnach

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

mit dem Landé-Faktor (gyromagnetischem Faktor)

$\boxed{g_e = 2}$: bestimmt um wieviel stärker sich der Spin auf die Teilchenenergie auswirkt als ein gleich großer Bahndrehimpuls

(Im Rahmen der Quantenelektrodynamik) werden Korrekturterme abgeleitet: $g_e^{th} = 2.0023193048(8)$

$g_e^{ex} = 2.00231930436(22)$

Mit dem Bohrschen Magneton (Betrag)

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

lässt sich das magnetische Spin-Moment des Elektrons ($m \equiv m_e$) schreiben als

$e \equiv -|$elektr. Elementarladung (Vorzeichen!) $\equiv -e_0$

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

Für ein Coulombpotential $e\phi = -\frac{Ze_0^2}{r}$ ist das Zeitverhalten der Lösung φ durch die Rydberg-Energie charakterisiert, $R_y = \frac{mc^2\alpha^2}{2} \rightarrow 13.6\,\mathrm{eV}$ für $Z=1$ ($\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$)

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

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

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

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

Impulsoperator in kovarianter Notation

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

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

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

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

(d.h. die Ableitungen werden ersetzt durch "Ableitung − Viererpotential")

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

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

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

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

Relativistisch kovariante Form der DE mit em. Feld

Kontinuitätsgleichung mit em. Feld

Aufgrund der Hermitezität des Hamilton-Operators ermöglicht die DE – im Gegensatz zur KGE – die Definition einer positiv definiten Wahrscheinlichkeitsdichte.

Beweis: DE

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

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

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

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

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

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

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

$$\vec{j} = \psi^+ c \vec{\alpha} \psi$$

Wendet man hierauf den Gaußschen Satz an, ergibt sich

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

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

Dies rechtfertigt zusammen mit

$$\psi^+\psi = \sum_i \psi_i^* \psi_i = \sum_i |\psi_i|^2 \geq 0$$

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

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

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

mit den Konsequenzen

- Orthogonalität der Eigenzustände hermitescher Operatoren mit verschiedenen Eigenwerten
- Darstellungsunabhängigkeit des Skalarprodukts unter unitären Transformationen:

Im Gegensatz zum nichthermiteschen Klein-Gordon-Fall ist im hermiteschen DIRAC-Fall keine Modifikation der in der nichtrelativistischen Theorie gebräuchlichen Begriffe "Skalarprodukt", "Hermitezität", und "Unitarität" erforderlich.

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

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

5. Invarianzen der Dirac-Gleichung

5.1 Lorentz-Kovarianz

Die Lorentz-Kovarianz wurde bereits bei der Ableitung der DE gefordert, d.h. sie ist in der Gestalt der DE berücksichtigt. Wegen der prinzipiellen Bedeutung soll sie dennoch erneut diskutiert werden.

Inertialsysteme sind Bezugsysteme, in denen sich Teilchen kräftefrei 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 (≡ Poincaré-Transformationen) haben die Gestalt

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

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

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

mit reellem $\Lambda^{\mu}{}_{\nu}$, a^{μ}.

RQM5

Linearität: Die Geradengleichung in Parameterdarstellung,

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

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

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

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

ergibt sich

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

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

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

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

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

$$\hat{=} \ \Lambda g \Lambda^T = g \ \checkmark$$

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

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

<u>Inhomogene LT</u> werden durch (Λ, a) charakterisiert, z.B.

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

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

Die <u>γ-Matrizen</u> ändern sich nicht bei LT.

<u>Eigentliche LT</u>: Ausschluss von Raumzeit-Translationen, Raumreflexion, Zeitspiegelung

<u>Spezielle eigentliche LT</u>: 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 Definitionsgleichung 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 $\Lambda^0{}_0$ werden zur Klassifizierung der Elemente der Lorentz-Gruppe $\mathcal{L}$ verwendet:

		$\operatorname{sgn} \Lambda^0{}_0$	$\det \Lambda$
eigentlich orthochron	$\mathcal{L}_+^\uparrow$	1	+1
uneigentlich "	$\mathcal{L}_-^\uparrow$	1	−1
zeitspiegelungsartig	$\mathcal{L}_-^\downarrow$	−1	−1
[illegible]	$\mathcal{L}_+^\downarrow$	−1	+1

5.2 Paritätstransformation P

Übergang von einem räumlichen kartesischen Rechts- zu einem Linkssystem:

$$P: \quad t \to t' = t$$
$$\vec{x} \to \vec{x}' = -\vec{x} \qquad \text{(Raumspiegelung: rechts} \Rightarrow \text{links, oben} \to \text{unten)}$$

Ist die DE

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

invariant unter dieser Transformation?

Ansatz 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?
(jetzt $\hbar \equiv c \equiv 1$)

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

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

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

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

$$S^{-1}(P)\,\gamma^0\, S(P) = \gamma^0 \qquad \gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}$$

$$S^{-1}(P)\,\gamma^j\, S(P) = -\gamma^j \qquad \gamma^j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^j \\ \sigma^j & 0 \end{pmatrix}$$

Das lässt sich erreichen durch die Wahl

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

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

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

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

sind dies

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

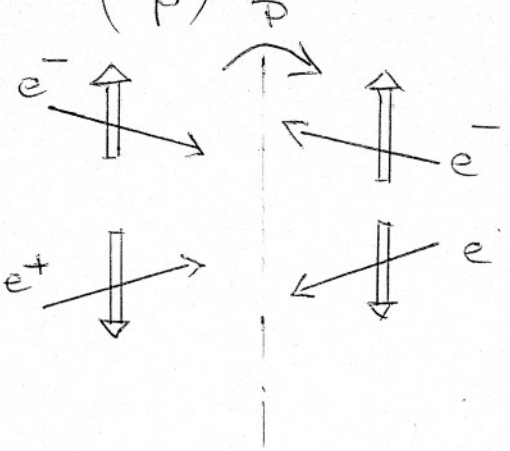
$$\{\psi(\vec{x}, t), \bar{\psi}(\vec{y}, t)\} = \gamma^0\delta^3(\vec{x} - \vec{y})$$

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 auseinander 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 $\vec{p}$.

d.h. 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 $\tau \simeq 125\,\mathrm{ps}$ und zerfällt in zwei Gammaquanten. Der Triplett-Zustand mit parallelen Spins $S=1$, $M_S=-1,0,1$ heisst Orthopositronium mit einer mittleren Lebensdauer von $\tau \simeq 142\,\mathrm{ns}$, und zerfällt i.a. in drei Photonen. Annihilation in meistens zwei-Photonen mit einer Gesamtenergie von 1022 keV erfolgt aus dem metastabilen 2S-Zustand in 1.1 µs, der Zerfall in den Grundzustand ist schneller).