1.4 Die Dirac-Gleichung

2. Vorlesung, 9.4.2010

Suche Differentialgleichung 1. Ordnung in der Zeit,
relativistische Kovarianz $\Rightarrow$ 1. Ordnung auch in Ortskoordinaten

$H^{rel}\Psi = i\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (\hbar = c = 1)$
$\uparrow$ zu bestimmen

<u>Ansatz:</u>

$$\begin{aligned} H^{rel} &= \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + \beta m \\ &= \vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m \end{aligned}$$

mit $\vec{p} = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \frac{\partial}{\partial x_3} \end{pmatrix}, \quad \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix}$

Es muss gelten $H^2 = \vec{p}^2 + m^2 \Rightarrow$ Bedingungen für α_i und β:

1. $\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 2\delta_{ij}$
2. $\alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0$
3. $\beta^2 = 1$

$\Rightarrow \alpha_i, \beta$ sind nicht vertauschbar
Behauptung: α_i, β müssen $n \times n$ Matrizen sein mit $n \geq 4$.

Dimension von α_i, β: $N \geq 4$

Beweis:

1. α_j, β hermitesch, weil H hermitesch: $\alpha_j^+ = ((\alpha_j)^*)^t$, $\beta^+ = \beta$
2. $\alpha_j^2 = \beta^2 = 1 \Rightarrow$ Eigenwerte von α_j, β sind ± 1.
3. α_j, β haben Spur$=$0

   Beweis:

   Spur(α_j) $=$ Spur$(\beta\ \beta\alpha_j)$ $=$ Spur$(\beta\alpha_j\ \beta)$ $=$ - Spur$(\beta\beta\alpha_j)$ $=$ -Spur(α_j) $=$ 0

   Spur(β) $=$ Spur$(\alpha_i\ \alpha_i\beta)$ $=$ Spur$(\alpha_i\beta\ \alpha_i)$ $=$ - Spur$(\alpha_i\alpha_i\beta)$ $=$ -Spur(β) $=$ 0

   Dabei benutzt: Spur(AB) $=$ Spur(BA) und $\alpha_j\beta = -\beta\alpha_j$
4. Spur(A) $= \sum$ Eigenwerte

   Da die Eigenwerte ± 1, muss N gerade sein

   Falls $N = 2$: gibt nur drei linear unabhängige Matrizen

   mit Spur $=$ 0 $\rightarrow$ Pauli Matrizen σ_1, σ_2, $\sigma_3 \Rightarrow N \geq 4$

Darstellung der α_j, β :

Die Paulimatrizen sind gegeben durch:

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

Die Diracmatrizen sind gegeben durch:

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & \mathbf{-1} \end{pmatrix}$$

(Dirac Darstellung)

existieren andere Darstellungen, z.B. die von Weyl

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & +i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ +i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Diracgleichung: $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\hbar c\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla}\Psi + mc^2\beta\Psi$

Bedeutung? Was ist Ψ? $\Rightarrow$ 4 Komponenten Spinor

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}, \quad \Psi^+ = (\Psi_1^*, \Psi_2^*, \Psi_3^*, \Psi_4^*)$$

Vermutung: $\rho = \Psi^+\Psi = \Psi_1^*\Psi_1 + \Psi_2^*\Psi_2 + .. \quad = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + |\Psi_3|^2 + |\Psi_4|^2$

Aufstellung einer Kontinuitätsgleichung: $(c = \hbar = 1)$

$\Psi^+\cdot$ Diracgleichung – komplex konjugierte Diracgleichung $\cdot\Psi$

a) $\Psi^+ i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\Psi^+\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla}\Psi \quad + m\Psi^+\beta\Psi$

b) $-i\frac{\partial\Psi^+}{\partial t}\Psi = +i(\vec{\nabla}\Psi^+)\cdot\vec{\alpha}\Psi + m\Psi^+\beta\Psi$

$$\begin{aligned} \dot{\rho} &= \frac{\partial}{\partial t}\Psi^+\Psi = \Psi^+\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{\partial\Psi^+}{\partial t}\Psi = -i[a) - b)] \\ &= -\Psi^+\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla}\Psi - (\vec{\nabla}\Psi^+)\cdot\vec{\alpha}\Psi = -\vec{\nabla}\vec{j}, \quad \text{mit } \vec{j} = \Psi^+\alpha\Psi \end{aligned}$$

Nichtrelativistischer Grenzfall der Dirac-Gleichung

zunächst freies, ruhendes Elektron

$\vec{k} = 0 \longrightarrow \vec{\nabla}\Psi = 0$

Diracgl.: $\quad i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = mc^2\beta\Psi$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\Psi_1\\\Psi_2\\\Psi_3\\\Psi_4\end{pmatrix} = mc^2\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Psi_1\\\Psi_2\\\Psi_3\\\Psi_4\end{pmatrix}$$

$\longrightarrow$ 4 unabhängige Lsg.

$$\Psi_1 = e^{-i\omega_0 t}\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix},\ \Psi_2 = e^{-i\omega_0 t}\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix},\ \Psi_3 = e^{+i\omega_0 t}\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix},\ \Psi_4 = e^{+i\omega_0 t}\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$$

$$E_1 = E_2 = \hbar\omega_0 = mc^2 \qquad\qquad E_3 = E_4 = -\hbar\omega_0 = -mc^2$$

Für folgende Diskussion des nichtrelativistischen Grenzfalles:
betrachte nur die positiven Energielösungen

Grenzfall: Kleine, aber nichtverschwindende kinetische Energie

$$E = \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \approx \underbrace{mc^2}_{\hbar\omega_0} + \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m}}_{\ll mc^2}$$

<u>Ansatz:</u>

$$\Psi(\vec{r},t) \approx \mathrm{e}^{-i\omega_0 t} \begin{pmatrix} \varphi(\vec{r},t) \\ \chi(\vec{r},t) \end{pmatrix} \qquad (\varphi, \chi \text{ haben jeweils 2 Kompon.})$$

φ, χ nur "langsam" zeitabhängig: $\varphi, \chi \sim e^{-i\omega' t}$ mit $\hbar\omega' = \frac{p^2}{2m}$

Zeige im Folgenden: $\chi \ll \varphi$ und φ erfüllt Schrödingergleichung

$$\Psi = e^{-i\omega_0 t} \begin{pmatrix} \varphi(\vec{r},t) \\ \chi(\vec{r},t) \end{pmatrix} \text{ in Diracgl. mit } \alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\varphi} \\ \dot{\chi} \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma}\cdot\vec{p} \\ \vec{\sigma}\cdot\vec{p} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & \mathbf{1} \end{pmatrix}$$

$\rightarrow$ Gl. für χ: $\underbrace{i\hbar\dot{\chi}}_{\substack{\hbar\omega'\chi \approx 0 \\ \ll mc^2}} = c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\varphi - 2mc^2\chi \qquad \Rightarrow \chi \approx \frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{2mc}\varphi$

$$\chi^+\chi = \frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})^2}{4m^2c^2}\varphi^+\varphi = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m}\cdot\frac{1}{2mc^2}}_{\ll 1}\varphi^+\varphi$$

d.h. für freies nichtrelativist. Elektronen: $\chi^+\chi \ll \varphi^+\varphi$

Einschub: Beweis $(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})^2 = \vec{p}^2\,\mathbf{1}$

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{p} = \sigma_1\,p_x + \sigma_2\,p_y + \sigma_3\,p_z = \begin{pmatrix} 0 & p_x \\ p_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -ip_y \\ +ip_y & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p_z & 0 \\ 0 & -p_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_z^2 + p_x^2 + p_y^2 & 0 \\ 0 & p_z^2 + p_x^2 + p_y^2 \end{pmatrix}$$

Gleichung für die (grosse) φ-Komponente

$$\underbrace{\hbar\omega_0}_{mc^2}\varphi + i\hbar\dot{\varphi} = c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\chi + mc^2\varphi$$

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})^2}{2m}\varphi = \frac{\vec{p}^2}{2m}\varphi \qquad \rightarrow \text{Schroedingergleichung!}$$

Nichtrelativ. Grenzfall der Diracgl. im elektromagnetischen Feld

zur Erinnerung:

$$H^{\text{Schrödinger}}_{\text{ohne Feld}} = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

$$H_{\text{mit Feld}} = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + q\Phi$$

Hier $\vec{A}$ = Vektorpotenzial und $q\Phi$ = potenzielle Energie im elektrischen Feld

$$\underbrace{\vec{p}}_{\text{ohne Feld}} \longrightarrow \vec{P} = (\vec{p} - q\vec{A})$$

$\vec{P}$ ist der kanonische Impuls aus Langrangefunktion und $\vec{p}$ der kinetische Impuls

---

nichtrelativistische Grenzfall der Dirac-Gleichung mit elektromagnetischem Feld:

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\varphi} &= \tfrac{1}{2m}(\vec{\sigma}\cdot\vec{P})(\vec{\sigma}\cdot\vec{P})\varphi + q\Phi\varphi \\ &= \tfrac{1}{2m}\left(\vec{\sigma}(\vec{p} - q\vec{A})\right)\left(\vec{\sigma}(\vec{p} - q\vec{A})\right)\varphi + q\Phi\varphi \end{aligned}$$

Übungsblatt 1 $\Rightarrow$ Pauli Gl. herleiten

Pauli-Gleichung und g Faktor

Mit $q = -e$ (Elektron) und $\vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B}$

$$\hookrightarrow i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m}(-i\hbar\vec{\nabla} + e\vec{A})^2 + \frac{e\hbar}{2m}\vec{\sigma}\cdot\vec{B} - e\Phi\right]\varphi \quad \text{Pauli Gleichung}$$

Term $\frac{e\hbar}{2m}\vec{\sigma}\cdot\vec{B} = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} =$ potenzielle Energie des magnetischen Momentes des Elektrons mit dem äusseren Magnetfeld, dieser Term fehlt in der Schrödingergleichung, weil Sie nichts vom Spin des Elektrons weiss!

$$|\mu_{\text{Elektron}}| = \underbrace{g}_{\text{g-Faktor}} \cdot \underbrace{\frac{e}{2m}}_{\text{gyromagnet. Verhältnis}} \cdot \underbrace{\frac{\hbar}{2}}_{\text{Spin}}$$

Aus Pauli Gl. $\rightarrow g = 2$, Gemessen $g = 2$[a], klassisch nicht erklärbar

$\Rightarrow$ wichtiger Erfolg der Dirac-Gleichung

[a] kleine Abweichung von g=2 durch QED Effekte, Diskussion später