Den ersten Term können wir wegen

$\hat{p}_i \hat{p}_k = \hat{p}_k \hat{p}_i$ symmetrisch schreiben

$$\hat{H}^2 = c^2 \sum_{i,k=1}^{3} \frac{\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i}{2} \hat{p}_i \hat{p}_k + mc^3 \sum_{i=1}^{3} (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) \hat{p}_i$$
$$+ \beta^2 m^2 c^4 \qquad (\text{VI } 6)$$

Hier kann nur $\hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4$ herauskommen, wenn die folgenden Antikommutatorrelationen erfüllt sind:

$$\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i = 2\delta_{ik}$$
$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \qquad (\text{VI } 7)$$
$$\beta^2 = 1.$$

- Diese Gleichungen sind mit Zahlen für α_i und β nicht erfüllbar

$\Rightarrow$ α_i, β sind Matrizen

$\Rightarrow$ ψ in $i\hbar \partial_t \psi = \hat{H} \psi$ ist ein Vektor

- Da nach (VI 7) $\beta^2 = \alpha_i^2 = 1$ ← Einheitsmatrix

$\Rightarrow$ Eigenwerte dieser Matrizen ± 1

- Die Spur verschwindet: $(\text{VI } 7) \Rightarrow \beta \alpha_i \beta + \underbrace{\beta^2 \alpha_i}_{\alpha_i} = 0$

$$\mathrm{Tr}\, \alpha_i = \mathrm{Tr} \underbrace{\beta^2}_{1} \alpha_i \underset{\text{zykl. Vertauschbarkeit}}{=} \mathrm{Tr}\, \beta \alpha_i \beta = - \mathrm{Tr}\, \alpha_i$$

$\Rightarrow \mathrm{Tr}\,\alpha_i = 0$

($\mathrm{Tr}\,\beta = 0 \rightarrow$ Übung).

- Da Spur = Summe der Eigenwerte

$\Rightarrow$ Dimension von α_i, β geradzahlig

- $N = 2$ ausgeschlossen, da nur 3 antikommutierende Matrizen (Pauli-Matrizen) + Einheitsmatrix zur Verfügung stehen (wir benötigen aber vier + Einheitsmatrix).

$\Rightarrow$ $\underline{N=4}$ kleinstmögliche Dim., in der $\underline{\text{VI}}$ erfüllbar

- Eine explizite Darstellung für α_i und β ist:

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

2×2 Pauli-Matrizen

2×2 Einheitsmatrizen

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

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- α_i, β müssen Hermitesch sein, damit auch $\hat{H}$ Hermitesch ist

- Wir wenden uns nun der Wahrsch.-Dichte und der Wahrsch.-Stromdichte zu.

$$i\hbar\partial_t\psi = \hat{H}\psi \quad \text{mit } \psi^+ = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*) \text{ von links}$$

$$\psi = \begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow i\hbar\psi^+\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{\hbar c}{i}\sum_{k=1}^{3}\psi^+\alpha_k\frac{\partial}{\partial x^k}\psi + mc^2\underbrace{\psi^+\beta\psi}_{(\cdots)(\vdots)(\vdots)} \qquad \text{(VI 8)}$$

Andererseits

$$\hat{H}^+ = \hat{H}, \quad \alpha_i^+ = \alpha_i, \quad \beta^+ = \beta$$

$$-i\hbar\partial_t\psi^+ = \hat{H}^+\psi^+ \quad \text{von rechts mit } \psi$$

$$-i\hbar(\partial_t\psi^+)\psi = -\frac{\hbar c}{i}\sum_{k=1}^{3}\left(\frac{\partial}{\partial x^k}\psi^+\right)\alpha_k\psi + mc^2\psi^+\beta\psi$$

Subtraktion von (VI 8)

$$\Rightarrow i\hbar\,\partial_t(\psi^+\psi) = \sum_{k=1}^{3}\frac{\hbar c}{i}\frac{\partial}{\partial x^k}(\psi^+\alpha_k\psi)$$

$$\Rightarrow \partial_t\underbrace{(\psi^+\psi)}_{\rho} + \sum_k\frac{\partial}{\partial x^k}\underbrace{(c\,\psi^+\alpha_k\psi)}_{j_k} = 0$$

$$\partial_t\rho + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = 0 \quad \checkmark$$

- Aber: bilden ρ und $\vec{j}$ wirklich einen Vierervektor.

Ist die Dirac-Gleichung kovariant?

- Bevor wir darauf eingehen, zunächst mal ein Test, ob der nicht-rel. Grenzfall reproduziert wird.

- Lösungen für ein ruhendes Elektron

$$\hat{\vec{p}} = \vec{0} \quad \Rightarrow \quad i\hbar \partial_t \psi = \beta m c^2 \psi$$

$\Rightarrow$ Lösungen

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

$$\psi_3 = e^{imc^2/\hbar \cdot t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_4 = e^{imc^2/\hbar \cdot t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

ψ_3, ψ_4 : negative Energie $-mc^2$, wird später auf Antiteilchen führen

- Ankopplung an ein äußeres Feld

Bekannt aus klass. Mechanik und nichtrel. QM

$$p^\mu \longrightarrow p^\mu - \frac{e}{c} A^\mu$$

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

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial ct} - \frac{e}{c}\phi\right)\psi = \left(\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) + \beta mc\right)\psi$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = \underbrace{\left(c\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) + \beta mc^2 + e\phi\right)}_{\hat{H}}\psi. \qquad (\underline{VI}\ 9)$$

Man sieht: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ mit

$$\hat{H}' = -e\vec{\alpha}\cdot\vec{A} + e\phi$$

Vgl. mit klass. Ergebnis $H'_{kl.} = -\frac{e}{c}\vec{v}\cdot\vec{A} + e\phi$ zeigt, daß

$$c\vec{\alpha}$$

die Rolle des <u>Geschwindigkeitsoperators</u> spielt (vgl. auch Strom j⃗ oben).

Bezeichnen wir den kinetischen Impuls mit

$$\vec{\pi} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \qquad (\text{VI } 10)$$

und benutzen die spezielle Darstellung

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

sowie die zweikomponentigen Spinoren $\tilde{\varphi}, \tilde{\chi}$,

$$\psi = \begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix}$$

so folgt für (VI 9)

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t \tilde{\varphi} &= c\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}\,\tilde{\chi} + e\phi\,\tilde{\varphi} + mc^2\,\tilde{\varphi} \\ i\hbar\partial_t \tilde{\chi} &= c\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}\,\tilde{\varphi} + e\phi\,\tilde{\chi} + mc^2\,(-\tilde{\chi}) \end{aligned} \qquad (\text{VI } 11)$$

– Um den nicht-rel. Grenzfall zu untersuchen, dürfen wir annehmen, daß mc^2 die <u>größte auftretende Energie</u> ist.

- Mit
$$\begin{bmatrix}\tilde{\varphi}\\ \tilde{\chi}\end{bmatrix} = e^{-imc^2/\hbar\, t}\begin{bmatrix}\varphi\\ \chi\end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow i\hbar\left(-\frac{imc^2}{\hbar}\begin{bmatrix}\varphi\\ \chi\end{bmatrix} + \partial_t\begin{bmatrix}\varphi\\ \chi\end{bmatrix}\right)e^{-imc^2/\hbar\, t}$$
$$= \left(c\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}\begin{bmatrix}\chi\\ \varphi\end{bmatrix} + e\Phi\begin{bmatrix}\varphi\\ \chi\end{bmatrix} + mc^2\begin{bmatrix}\varphi\\ -\chi\end{bmatrix}\right)e^{-imc^2/\hbar\, t}$$

$$\Rightarrow i\hbar\partial_t\begin{bmatrix}\varphi\\ \chi\end{bmatrix} = c\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}\begin{bmatrix}\chi\\ \varphi\end{bmatrix} + e\Phi\begin{bmatrix}\varphi\\ \chi\end{bmatrix} - 2mc^2\begin{bmatrix}0\\ \chi\end{bmatrix} \qquad (\text{VI } 12)$$

Wir nehmen nun an, wir befinden uns in einem Bezugssystem, so daß

$$|i\hbar\partial_t\chi| \ll |2mc^2\chi| \quad \text{und}$$
$$|e\Phi\chi| \ll |2mc^2\chi|$$

$\Rightarrow$ für die zweite Zeile von (VI 12)

$$\chi = \frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}}{2mc}\varphi \qquad (\text{VI } 13)$$

Man sieht: in einem solchen System sind die Komponenten von χ $\frac{1}{2}\frac{v}{c}\cdot\frac{\pi}{mc} \ll 1$ mal kleiner als die Komponenten von φ (χ heißen die „kleinen Komponenten" von Ψ).

- Einsetzen von (VI 13) in erste Zeile von (VI 12) $\Rightarrow$

$$i\hbar\partial_t\varphi = \left(\frac{1}{2m}(\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi})(\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}) + e\Phi\right)\varphi. \qquad (\text{VI } 14)$$

Allgemein gilt für die Pauli-Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (\text{VI } 15)$$

und beliebige Vektoren $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3)$, $\vec{b} = (b_1, b_2, b_3)$

2×2-Matrizen

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b}\, \mathbb{1} + i\, \vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b}) .$$

(→ Übung) (VI 16)

Für $\vec{a} = \vec{b} = \vec{\pi}$

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

$$\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) \times \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)$$

$$= \hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\, \hat{\vec{p}} \times \vec{A} - \frac{e}{c}(\vec{A} \times \hat{\vec{p}}) + \left(\frac{e}{c}\right)^2 \vec{A} \times \vec{A}$$

Wie ist das auszuwerten, wenn dies nun auf eine Wellenfunktion $\varphi(\vec{r}, t)$ wirkt ?

$$(\vec{\pi} \times \vec{\pi})_i\, \varphi = \varepsilon_{ijk}\, \pi_j \pi_k \varphi$$

$$= \varepsilon_{ijk} \left(p_j - \frac{e}{c} A_j\right)\left(p_k - \frac{e}{c} A_k\right) \varphi$$

$$= \varepsilon_{ijk} \left(p_j p_k - \frac{e}{c} p_j A_k - \frac{e}{c} A_j p_k + \frac{e^2}{c^2} A_j A_k \right) \varphi$$

$$= \varepsilon_{ijk} \left(\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \partial_j \partial_k \varphi - \frac{e\hbar}{ci} \partial_j A_k \varphi - \frac{e\hbar}{ci} A_j \partial_k \varphi + \frac{e^2}{c^2} A_j A_k \varphi \right)$$

$$= -\frac{e\hbar}{ci}\,\varepsilon_{ijk}\left(\partial_j A_k \varphi + A_j \partial_k \varphi\right)$$

$$= -\frac{e\hbar}{ci}\left\{\varepsilon_{ijk}(\partial_j A_k)\varphi + \underbrace{\varepsilon_{ijk} A_k \partial_j \varphi + \varepsilon_{ijk} A_j \partial_k \varphi}\right\}$$

$$\varepsilon_{ijk} A_k \partial_j \varphi + \varepsilon_{ikj} A_k \partial_j \varphi$$

$$= A_k \partial_j \varphi \,(\varepsilon_{ijk} + \underbrace{\varepsilon_{ikj}}_{-\varepsilon_{ijk}})$$

$$= 0$$

$$= -\frac{e\hbar}{ci}\,\varepsilon_{ijk}(\partial_j A_k)\varphi$$

$$= -\frac{e\hbar}{ci}\,(\vec{\nabla}\times\vec{A})_i\,\varphi$$

$$\Rightarrow (\vec{\pi}\times\vec{\pi})\varphi = -\frac{e\hbar}{ci}\underbrace{(\vec{\nabla}\times\vec{A})}_{\vec{B}}\varphi$$

$$\Rightarrow (\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi})(\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}) = \pi^2 - \frac{e\hbar}{c}\,\vec{\sigma}\cdot\vec{B}. \qquad (\text{VI } 17)$$

$$\Rightarrow i\hbar\partial_t \varphi = \left[\frac{(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc}\,\vec{\sigma}\cdot\vec{B} + e\phi\right]\varphi$$

(VI 18)

Pauli-Gleichung

→ der nicht-relativistische Grenzfall macht Sinn

- Ein weiterer spektakulärer Erfolg der Dirac-Gleichung bereits im nicht-rel. Grenzfall betrifft den gyromagnetischen Faktor (g-Faktor) des Elektrons:

- Betrachten wir ein ein schwaches homogenes Magnetfeld

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}, \quad \vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r}, \quad \phi = 0$$

und vernachlässigen den quadratischen Term A^2 in

$$\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \approx \hat{p}^2 - \frac{e}{c}\hat{\vec{p}}\cdot\vec{A} - \frac{e}{c}\vec{A}\cdot\hat{\vec{p}}$$

$$= \hat{p}^2 - \frac{1}{2}\frac{e}{c}\hat{\vec{p}}\cdot(\vec{B}\times\vec{r}) - \frac{1}{2}\frac{e}{c}(\vec{B}\times\vec{r})\cdot\hat{\vec{p}}$$

$$= \hat{p}^2 - \frac{1}{2}\frac{e}{c}\hat{p}_i\,\varepsilon_{ijk}B_j x_k - \frac{1}{2}\frac{e}{c}\varepsilon_{ijk}B_j x_k\,\hat{p}_i$$

$$= \hat{p}^2 - \frac{1}{2}\frac{e\hbar}{ci}\partial_i\,\varepsilon_{ijk}B_j x_k - \frac{1}{2}\frac{e\hbar}{ci}\varepsilon_{ijk}B_j x_k\partial_i$$

$$= \hat{p}^2 - \frac{1}{2}\frac{e\hbar}{ci}\varepsilon_{ijk}B_j \underbrace{\frac{\partial x_k}{\partial x_i}}_{\delta_{ki}} - \frac{1}{2}\frac{e\hbar}{ci}\varepsilon_{ijk}B_j x_k\partial_i - \frac{1}{2}\frac{e\hbar}{ci}\varepsilon_{ijk}B_j x_k\partial_i$$

$\hookrightarrow \varepsilon_{iji} = 0$

$$= \hat{p}^2 - \frac{e\hbar}{ci}\varepsilon_{ijk}B_j x_k\partial_i$$

$\varepsilon_{ijk} = \varepsilon_{jki}$

$$= \hat{p}^2 - \frac{e\hbar}{ci}\varepsilon_{jki}B_j x_k\partial_i$$

$$= \hat{p}^2 - \frac{e}{c}\underbrace{(\vec{r}\times\hat{\vec{p}})}_{\vec{L}}\cdot\vec{B}$$

$$\Rightarrow \; i\hbar\partial_t\varphi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}\hat{\vec{L}}\cdot\vec{B} - \frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}\right)\varphi$$

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

$$\Rightarrow \; i\hbar\partial_t\varphi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}(\hat{\vec{L}} + \underset{\substack{\uparrow \\ g=2}}{2}\hat{\vec{S}})\cdot\vec{B}\right)\varphi . \qquad (\underline{\text{VI}}\ 19)$$

<u>Kovariante Schreibweise</u>

Multiplizieren wir ($\underline{\text{VI}}$ 5) mit β/c:

$$\Rightarrow \left(i\hbar\beta\frac{\partial}{\partial ct} - \frac{\hbar}{i}\beta\left(\alpha_1\frac{\partial}{\partial x^1} + \alpha_2\frac{\partial}{\partial x^2} + \alpha_3\frac{\partial}{\partial x^3}\right) - \underbrace{\beta^2}_{1} mc\right)\psi = 0$$

und führen

$$\gamma^0 = \beta, \quad \gamma^i = \beta\alpha_i, \quad i = 1,2,3 \qquad (\underline{\text{VI}}\ 20)$$

ein

$$\Rightarrow \; i\hbar\left(\gamma^0\frac{\partial}{\partial x^0} + \gamma^1\frac{\partial}{\partial x^1} + \gamma^2\frac{\partial}{\partial x^2} + \gamma^3\frac{\partial}{\partial x^3}\right)\psi - mc\,\psi = 0 \qquad (\underline{\text{VI}}\ 21)$$

$x^\mu = (ct, x^1, x^2, x^3)$

Die Vertauschungsrelationen ($\underline{\text{VI}}$ 7) vereinfachen sich zu

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}\,\underset{\substack{\uparrow \\ 4\times4\text{-Matrix}}}{\mathbb{1}} \qquad (\underline{\text{VI}}\ 22)$$

($\rightarrow$ Übung)