

Kapitel 5

Relativistische Quantenmechanik

Anliegen einer relativistischen Quantenmechanik ist die Hochzeit der Quantenmechanik mit den Prinzipien der Relativitätstheorie. Als ersten Schritt sucht man die nicht-relativistische Schrödingergleichung derartig abzuändern, dass sie den Ansprüchen der relativistischen Kovarianz genügt: die gesuchte Gleichung sollte unter Poincaré-Transformationen ihre Form behalten. Als Leitfaden dient dabei das Korrespondenzprinzip, wonach Energie E und Impuls \vec{p} in der relativistischen Energie-Impulsbeziehung $E = H(\vec{p}, \vec{q})$ in Differentialoperatoren übersetzt werden,

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}. \quad (5.1)$$

Als Resultat erhält man Wellengleichungen, Klein-Gordon bzw Dirac, die als Ausgangspunkt einer relativistischen Quantenmechanik fungieren.

Wie jede gute Theorie hat auch die relativistische Quantenmechanik einen begrenzten Gültigkeitsbereich. Nach der Heisenbergschen Unschärferelation $\Delta x \Delta p \leq \hbar$ bedeutet jeder Versuch Teilchen der Masse m auf ihrer Compton-Wellenlänge zu lo-

kalisieren, $\Delta x < (\hbar/mc)$, eine Impulsunschärfe $\Delta p \geq mc$. Die damit einhergehende Energieunschärfe $\Delta E > mc^2$ übersteigt die Ruheenergie, und stellt daher genügend Energie zur Verfügung, neue Teilchen entstehen zu lassen, die sich in Nichts von den “Originalteilchen” unterscheiden. Da solche Prozesse den Rahmen einer “ein-Teilchen” Theorie sprengen kann die relativistische Quantenmechanik – und die wird hier immer als ein-Teilchen Theorie aufgefasst – nur ein Zwischenschritt sein auf dem Weg zu einer relativistischen Theorie ununterscheidbarer Teilchen: der Quantenfeldtheorie.

Das Scheitern einer relativistischen “Ein-Teilchen Quantenmechanik” sollte nicht überraschen: schon das Elektromagnetische Feld kann ja nicht als Ansammlung unzerstörbarer Punktteilchen (Photonen) aufgefasst werden: in jedem Absorptionsakt verschwindet ein Photon, in jedem Emissionsakt wird ein Photon geboren.

Ebenso die Wechselwirkung von Elektronen mit Positronen. Ist die kinetische Energie der Relativbewegung nur groß genug, werden im Stoß ein Elektron und ein Positron unter Erzeugung zweier Gamma-Quanten (zweier Photonen) vernichtet. Kurz: eine Quantenmechanik des unzerstörbaren Massepunktes “Elektron” ist schon aus empirischen Gründen grundsätzlich nicht haltbar.

Trotzdem hat die relativistische Quantenmechanik ihre Berechtigung: solange man es nur mit freien Teilchen zu tun hat, also keinerlei Wechselwirkung im Spiel ist, liefert sie schon die “richtigen” Gleichungen. Und selbst wenn die Wechselwirkung (mit einem externen Potential, beispielsweise) berücksichtigt wird, liefert die relativistische Quantenmechanik schon ganz brauchbare Resultate. Man darf halt nur die involvierten Energien nicht zu hoch treiben – oder die Lokalisierung zu weit, siehe oben.

5.1 Klein-Gordon Gleichung

Im Falle des freien Teilchens

$$E = H(\vec{p}) \equiv \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2} \quad (5.2)$$

erhält man mittels Korrespondenz (5.1) eine Wellengleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi = \sqrt{m^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2} \phi. \quad (5.3)$$

Unangenehm ist hier die Wurzel – in der Taylorentwicklung tauchen alle Potenzen von $\Delta = \vec{\nabla}^2$ auf: die Theorie ist *nichtlokal*.

Die Wurzel wird vermieden indem man die die Energie-Impuls-Beziehung zunächst quadriert, $E^2 = c^2 \vec{p}^2 + m^2 c^4$, dann umstellt, $-(E^2/c^2 - \vec{p}^2) + m^2 c^2 = 0$, und schließlich das Korrespondenzprinzip (5.1) aufruft,

$$\partial_\mu \partial^\mu \phi(x) + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \phi(x) = 0. \quad (5.4)$$

Der Differentialoperator $\partial_\mu \partial^\mu$ (über doppelt auftretende schräg gestellte Indices wird summiert) ist übrigens der aus der Elektrodynamik vertraute D'Alembert Differentialoperator,

$$\partial_\mu \partial^\mu \equiv \square = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta. \quad (5.5)$$

Und da D'Alembert ein Lo'ska, ist $(\)$ forminvariant unter Lo'tra $x \rightarrow x' = \Lambda x$ – wobei stillschweigend vorausgesetzt wird, dass ϕ sich wie ein skalares Feld transformiert, $\phi(x) \rightarrow \phi'(x') = \phi(\Lambda^{-1} x')$.

Gleichung (5.4) ist die sog. *Klein-Gordon Gleichung*. Die Klein-Gordon Gleichung ist für die relativistische Quantenmechanik bzw. -Feldtheorie von hervorragender

Bedeutung. Freie Teilchen ohne Spin, ob mit oder ohne Ladung, werden durch sie beschrieben. Dazu gehören beispielsweise die neutralen π^0 Mesonen (falls ϕ reell) und die elektrisch geladenen π^\pm Mesonen (ϕ komplex).

5.1.1 Lösungen der KG-Gleichung

Spezielle Lösungen der Klein-Gordon Gleichung sind beispielsweise ebene Wellen,

$$\phi_{\pm, \vec{k}}(\vec{x}, t) \propto e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega_{\pm} t)} \quad (5.6)$$

mit Dispersionrelation $\omega_{\pm} \equiv \omega_{\pm}(\vec{k})$,

$$\omega_{\pm}(\vec{k}) = \pm c \sqrt{\vec{k}^2 + (mc/\hbar)^2} \quad (5.7)$$

Nach den Regeln der Quantenmechanik interpretiert beschreibt $\phi_{+, \vec{k}}$ Teilchen mit Impuls $\hbar \vec{k}$ und Energie $E = \hbar \omega_+$. Die Funktion $\phi_{-, \vec{k}}$ hingegen kommt mit dem "falschen" Vorzeichen im zeitlichen Phasenfaktor. Man sagt $\phi_{-, \vec{k}}$ beschreibe Teilchen *negativer* Energie (und Impuls $\hbar \vec{k}$). Offensichtlich beschreibt auch $\phi_{+, \vec{k}}^*$ Teilchen mit negativer Energie, allerdings mit Impuls $-\hbar \vec{k}$.

5.1.2 KG Kontinuitätsgleichung

Der Differentialoperator in (5.4) ist reell; mit ϕ genügt auch ϕ^* der Klein-Gordon Gleichung. Differenz der beiden Gleichungen liefert zunächst $\phi^* \square \phi - \phi \square \phi^* = 0$ bzw.

$$\partial_0 [\phi^* \partial_0 \phi - \phi \partial_0 \phi^*] - \vec{\nabla} \cdot [\phi^* \vec{\nabla} \phi - \phi \vec{\nabla} \phi^*] = 0. \quad (5.8)$$

Verabredet man hier abkürzend¹

$$\rho := \frac{i\hbar}{2mc^2} [\phi^* \dot{\phi} - \phi \dot{\phi}^*], \quad \vec{j} := \frac{\hbar}{2mi} [\phi^* \vec{\nabla} \phi - \phi \vec{\nabla} \phi^*], \quad (5.9)$$

lässt sich letzteres auch als *Kontinuitätsgleichung* schreiben,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0. \quad (5.10)$$

Integration über den ganzen \mathbb{R}^3 , Anwendung des Gauss'schen Satzes, Annahme $\vec{j}|_{\partial\mathbb{R}^3} = 0$, liefert Erhaltungssatz,

$$\frac{d}{dt} Q = 0, \quad \text{wobei} \quad Q := \frac{i\hbar}{2mc^2} \int [\phi^* \dot{\phi} - \phi \dot{\phi}^*] d^3x. \quad (5.11)$$

5.1.3 Minimale Kopplung

Die Bewegung eines Teilchens der Ladung e im elektromagnetischen Feld, Sie erinnern sich, wird in der in minimaler Kopplung beschrieben, $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi$ und $\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - e\vec{A}$. Mittels 4er Impuls ($p^\nu \equiv (E/c, \vec{p})$) und 4er Potential ($A^\mu \equiv (\Phi/c, \vec{A})$) daher (beachte Stellung des 4-er Index)

$$p_\nu \rightarrow i\hbar \partial_\nu - eA_\nu, \quad (5.12)$$

Das passt übrigens ganz gut: Ableitung nach kontravarianten Koordinaten x^μ gibt kovariante Komponenten.

¹Die multiplikative Konstante ist Konvention; hier wurde sie so gewählt, dass unter Annahme $[\phi] = 1/\sqrt{V}$ die Noetherladung Q dimensionslos, später interpretiert "Anzahl-Differenz von Teilchen und Antiteilchen".

Verabredet man hier einen Differentialoperator

$$D_\mu := \partial_\mu + i \frac{e}{\hbar} A_\mu \quad (5.13)$$

schreibt sich die Klein-Gordon Gleichung in der Form

$$D_\mu D^\mu \phi + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \phi = 0. \quad (5.14)$$

[Hier (Übungen): Kontinuitätsgleichung]

[Schöne Übungsaufgabe:] Gleichung (5.14) ist die relativistische Variante der Schrödingergleichung des skalaren (=spinlosen) geladenen Punktteilchens im elektromagnetischen Feld. Um das zu verifizieren, setzen wir $\phi(\vec{x}, t) = e^{-imc^2/\hbar\psi(\vec{x}, t)}$ wobei $\psi(\vec{x}, t)$ langsam zeitlich veränderlich, $|\dot{\psi}/\psi| \ll mc^2$, und vernachlässigen den Beschleunigungsterm $\ddot{\psi}$, begründet $\psi \ll mc^2\psi \dots$

Der Differentialoperator (D_μ) heißt *kovariante Ableitung*. Das "Kovariieren" bezieht sich dabei aber nicht auf das Verhalten unter Lo'tra, sondern bezieht sich auf das Transformationsverhalten unter Eichtransformationen,

$$\phi \rightarrow \phi' = e^{-i\frac{e}{\hbar}\chi} \phi, \quad (5.15)$$

$$A_\mu \rightarrow A'_\mu = A_\mu + \partial_\mu \chi \quad (5.16)$$

gemäß

$$D_\mu \phi \rightarrow D'_\mu \phi' = e^{-i\frac{e}{\hbar}\chi} D_\mu \phi \quad (5.17)$$

Abschließend halten wir fest, dass die Klein-Gordon Gleichung zwar relativistisch kovariant ist, die Funktion ϕ aber nicht im Sinne der Quantenmechanik interpretiert werden kann: Als partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung in der Zeit müssen zwei Anfangswerte vorgegeben werden, ϕ und $\dot{\phi}$, um zu einer eindeutigen

Lösung zu gelangen. Das Zustandspostulat der Quantenmechanik besagt aber, dass der Zustand durch Angabe von ϕ bereits vollständig charakterisiert sein sollte – was in der Klein-Gordon Theorie offensichtlich nicht erreicht werden kann.

Damit verknüpft

- Es lässt sich keine W'keitsdichte angeben. Die in () eingeführte Dichte ist nicht nicht-negativ, kann daher nicht als W'keitsdichte aufgefasst werden, sondern wird vielmehr als Ladungsdichte interpretiert.
- Es gibt Lösungen "negativer Energie" – beim Quadrieren ist nämlich die Vorzeichen-Information der Wurzel verloren gegangen.

Da ϕ nicht im Sinne der gewöhnlichen, sog *Einteilchen-Quantenmechanik* interpretiert werden kann wurde die KG anfänglich verworfen. Eine andere Gleichung, die Dirac-Gleichung übernahm zunächst die Regie, obwohl auch diese Gleichung zu einigen Schwierigkeiten in der Interpretation Anlass gab.

Erst Mitte der 30'er Jahre wieder die KG-Gleichung wieder zum Leben erweckt wurde – nur jetzt aufgefasst als Heisenberggleichung für ein *Quantenfeld* $\hat{\phi}$.

Die Funktion gestattet eine Fourierreentwicklung.

$$\phi = \sum_k a_{\vec{k}}(t) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \quad (5.18)$$

worin die (komplexen) Fourierkoeffizienten einer gewöhnlichen DGL genügen,

$$\ddot{a}_k(t) + \omega_k^2 a_k(t) = 0, \quad (5.19)$$

worin $\omega_k = \sqrt{c^2 \vec{k}^2 + m^2 c^4 / \hbar^2}$, vgl. auch (). Wir schauen hier auf die Bewegungsgleichung des Harmonischen Oszillators (mit komplexer Auslenkung $a_{\vec{k}}$). Wie der

zu quantisieren ist weiß man schon aus der QM-I Vorlesung, und also weiß man eigentlich schon, wie die KG-Theorie zu quantisieren ist ...

Kapitel 6

Dirac Gleichung

6.1 Freie Diracgleichung

Wegen der zweifachen Zeitableitung erschien die Klein-Gordon Gleichung als Wellengleichung für die Quantenmechanik zunächst problematisch. Sucht man nun eine Wellengleichung mit nur einfacher Zeitableitung sollten im Sinne der Relativitätstheorie auch die räumlichen Ableitungen nur von erster Ordnung sein. Dirac's Ansatz¹ (wir schreiben $x = (\vec{x}, t)$)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x) = \underbrace{\left[c \sum_{j=1}^3 \alpha^j \frac{\hbar}{i} \partial_j + mc^2 \beta \right]}_{:=H_D} \Psi(x). \quad (6.1)$$

¹P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. (London)*, **A 117**, 610 (1928); *ibid.* **A 118**, 351 (1928).

Die Konstanten α^i (und β) sind dabei sicherlich keine gewöhnlichen Zahlen – sonst wäre ja eine Richtung im Raum ausgezeichnet – sondern von anderer Natur, beispielsweise $N \times N$ -Matrizen. Entsprechend ist Ψ nicht einfach nur eine komplexwertige Funktion, sondern eine $N \times 1$ Spaltenmatrix

$$\Psi(x) = \begin{bmatrix} \Psi_1(x) \\ \vdots \\ \Psi_N(x) \end{bmatrix}, \quad (6.2)$$

worin die Komponentnen $\Psi_i(x) \equiv \Psi_i(\vec{x}, t)$, $i = 1, \dots, N$ komplexwertige Funktionen. Wie sich gleich herausstellt ist für massive Teilchen, also $m > 0$, mindestens $N = 4$. Eine 4×1 Spaltenmatrix komplexwertiger Funktionen heißt *Dirac-Spinor*.²

Der Differentialoperator auf der rechten Seite von Gl. (6.1) fungiert als Hamiltonoperator der Diracschen Wellenmechanik. Um eine W'keitsinterpretation (Normerhaltung) zu garantieren, sollte der Hamiltonoperator selbstadjungiert sein, die Matrizen β, α^i entsprechend hermitesch,

$$\beta^\dagger = \beta, \quad \alpha^{i\dagger} = \alpha, \quad i = 1, 2, 3. \quad (6.3)$$

Um weiter Eigenschaften der Matrizen β, α^i festzulegen, erinnern wir uns an die Energie-Impulsbeziehung $E = \sqrt{c^2\vec{p}^2 + m^2c^4}$, und identifizieren den Hamiltonoperator auf der rechten Seite von (6.1) mit einer Darstellung der Wurzel $\sqrt{c^2\vec{p}^2 + m^2c^4} = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2$. Quadrieren dieser Gleichung liefert $c^2\vec{p}^2 + m^2c^4 = [c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2]^2$; Ausmultiplizieren der rechten Seite, dabei beachten dass die Matrizen β, α^i nicht

²Genauer: eine 4×1 Spaltenmatrix heißt Dirac-Spinor genau dann wenn sie sich unter Poincaré-Transformationen gemäß () transformiert.

kommutieren, liefert nach Koeffizientenvergleich mit der linken Seite

$$\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i = 2\delta^{ij}, \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (6.4)$$

$$\alpha^i \beta + \beta \alpha^i = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad (6.5)$$

$$\beta^2 = 1. \quad (6.6)$$

Kurz – wir brauchen 4 antikommutierende, hermitesche Matrizen $\beta, \alpha^1, \alpha^2, \alpha^3, \alpha^4$. Wegen $(\alpha^i)^2 = (\beta)^2 = 1$ sind die Eigenwerte der gesuchten Matrizen ± 1 . Aus $\alpha^i \beta + \beta \alpha^i = 0$ folgt $\alpha^i = -\beta \alpha^i \beta$. Spurbildung, und Berücksichtigung der zyklischen Invarianz unter der Spur, impliziert $\text{Tr} \alpha^i = \text{Tr} \beta = 0$, also Entartung der positiven Eigenwerte +1 gleich Entartung der negativen Eigenwerte -1 , und also Dimension $N = 4$. Für $N = 2$ gibt es aber nur 3 antikommutierende Matrizen (die Paulimatrizen); kleinstes mögliches N daher $N = 4$. In der sog **Standard-Darstellung**

$$\beta = \begin{bmatrix} 1_2 & 0_2 \\ 0_2 & -1_2 \end{bmatrix}, \quad \alpha^i = \begin{bmatrix} 0_2 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0_2 \end{bmatrix}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (6.7)$$

worin 1_2 die 2×2 Einheitsmatrix, 0_2 die 2×2 Nullmatrix, und σ^i die **Paulimatrizen**,

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (6.8)$$

Andere Darstellungen erhält man via Ähnlichkeitstransformation $(\beta, \alpha^i) \rightarrow M(\beta, \alpha^i)M^{-1}$ mit nicht-singulärer 4×4 -Matrix M .

Die Diracgleichung ist Ausgangspunkt der Dirac'schen Wellenmechanik. Bestandteile sind

- *Kontinuitätsgleichung (Wkeitserhaltung):*

Nach den Regeln der Matrizenrechnung genügt der **hermitesche adjungierte Spinor**

$$\Psi^\dagger(x) = [\Psi_1^*(x), \dots, \Psi_4^*(x)] \quad (6.9)$$

einer Dirac-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^\dagger(x) = \Psi^\dagger(x) \left[c\alpha^j \overleftarrow{\partial}_j - mc^2\beta \right], \quad (6.10)$$

wobei $\overleftarrow{\partial}_j$ eine “nach links” wirkende Ableitung.

Aus der Dirac-Gleichung (6.1) und ihrer hermitesch konjugierten Schwester (6.10) lässt sich nun leicht eine **Kontinuitätsgleichung** ableiten,

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho(\vec{x}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = 0, \quad (6.11)$$

worin $\varrho(\vec{x}, t)$, $\vec{j}(\vec{x}, t) = (j^1, j^2, j^3)$ gegeben sind

$$\varrho(\vec{x}, t) = \Psi^\dagger(\vec{x}, t)\Psi(\vec{x}, t), \quad j^i(\vec{x}, t) = c\Psi^\dagger(\vec{x}, t)\alpha^i\Psi(\vec{x}, t), \quad i = 1, 2, 3. \quad (6.12)$$

Da ϱ reell, nicht-negativ, wird ϱ als W'keitsdichte der Diracschen Wellenmechanik interpretiert, und $\vec{j} = c\Psi^\dagger\vec{\alpha}\Psi$ entsprechend als W'keitsstromdichte.³

- *Observable/Messgrößen:*

Messgrößen bzw. Observable, daran sei erinnert, werden durch selbstadjungierte Operatoren beschrieben. Operatoren, die mit dem Hamiltonoperator vertauschen, definieren Erhaltungsgrößen. Eine Messgröße der Dirac'schen Wellenmechanik ist beispielsweise der Ort \vec{q} , wie üblich erklärt $(\vec{q}\Psi)(\vec{x}) = \vec{x}\Psi(\vec{x}, t)$.⁴

³Es sei aber darauf hingewiesen, dass in einer quantenfeldtheoretischen Reformulierung der Dichteoperator $\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}$ zwar hermitesch, aber nicht definit, daher nicht als Teilchendichte sondern als Ladungsdichte interpretiert wird.

⁴Die Dirac'sche Wellenmechanik wird traditionell in der Ortsdarstellung formuliert. Darstellungswechsel, wie sie in der Quantenmechanik gang und gäbe sind, spielen eine untergeordnete Rolle. Hüte auf den Operatoren können daher weggelassen werden.

Erhaltungsgrößen der Dirac'schen Wellenmechanik sind – neben der Energie H_D – der Impuls

$$\hat{P} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \quad (6.13)$$

und der Drehimpuls⁵

$$\vec{J} = \vec{x} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma}, \quad (6.14)$$

worin $\vec{\Sigma}$ der “Dirac'sche Paulispin”, in der Standarddarstellung (6.7)

$$\vec{\Sigma} = \begin{bmatrix} \vec{\sigma} & 0_2 \\ 0_2 & \vec{\sigma} \end{bmatrix}. \quad (6.15)$$

Für masselose Diraceteilchen, also $m = 0$, gibt es eine weitere Erhaltungsgröße **Chiralität**, in der Standarddarstellung

$$\gamma^5 \equiv \gamma_5 := -i\alpha^1\alpha^2\alpha^3 = \begin{bmatrix} 0_2 & 1_2 \\ 1_2 & 0_2 \end{bmatrix}. \quad (6.16)$$

Chiralität spielt im Standardmodell nicht nur für die Modellierung masseloser Fermionen, sondern insbesondere auch für die Analyse hochenergetischer Prozesse (wo die Ruhemassen gegenüber der kinetischen Energien vernachlässigbar sind) eine wichtige Rolle.

- *(Ruhe-)Lösungen der Diracgleichung:*

Die Diracgleichung besteht aus vier gekoppelten partielle Differentialgleichungen erster Ordnung. Für ruhendes Teilchen, $\vec{\nabla}\Psi = 0$, sind die linear un-

⁵Pedantisch notiert ist der Impuls $\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \otimes 1_4$ und Drehimpuls $\vec{J} = \vec{x} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \otimes 1_4 + \text{id}_{\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3, \ell^3 \otimes \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma})} \otimes \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma}$.

abhängigen Lösungen schnell gefunden,

$$\Psi_{0\uparrow}^{(+)}(\vec{x}, t) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t}}{\sqrt{V}}, \quad \Psi_{0\uparrow}^{(+)}(\vec{x}, t) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t}}{\sqrt{V}}, \quad (6.17)$$

$$\Psi_{0\uparrow}^{(-)}(\vec{x}, t) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \frac{e^{+\frac{i}{\hbar}mc^2t}}{\sqrt{V}}, \quad \Psi_{0\downarrow}^{(-)}(\vec{x}, t) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \frac{e^{+\frac{i}{\hbar}mc^2t}}{\sqrt{V}}. \quad (6.18)$$

mit $\pm mc^2$ die beiden Eigenwerte des Dirac-Hamiltonians für ruhende Teilchen, und V das Systemvolumen. Lösungen für bewegte Teilchen werden weiter unten angegeben.

Im Vergleich mit der nicht-relativistischen Quantenmechanik, wo Energiezustände $\propto e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ oszillieren, sagt man $\Psi^{(+)}$ seien Lösungen zu positiver (Ruhe-)Energie, während $\Psi^{(-)}$ Lösungen zu negativer Energie.

Offensichtlich sind die beiden Eigenwerte $\pm mc^2$ jeweils zweifach entartet. Was hier durchschimmert, ist der Spinfreiheitsgrad des Dirac-Teilchens. Jede komplexe Linearkombination von $\Psi_{0\uparrow}^{(+)}$ und $\Psi_{0\downarrow}^{(+)}$ ist Lösung der Diracgleichung zur Energie mc^2 . Solche Linearkombinationen spannen eine zwei-dimensionalen komplexen Vektorraum, isomorph \mathbb{C}^2 – dem Darstellungsraum eines Spin-1/2 Freiheitsgrades. Entsprechend nennt man $\Psi_{0\uparrow}^{(+)}$ eine Lösung positiver Energie mit Spin rauf, $\Psi_{0\downarrow}^{(+)}$ eine Lösung positiver Energie mit Spin runter. Die Adjektive “rauf” bzw. “runter” beziehen sich dabei auf die beiden Eigenwerte $\sigma = \pm 1$ von Σ^3 , wobei $\sigma = +1$ für “rauf”, $\sigma = -1$ für “runter”. Das gleiche gilt für die Lösungen zu negativer Energie: $\Psi_{0\uparrow}^{(-)}$ eine Lösung negativer Energie mit Spin rauf, $\Psi_{0\downarrow}^{(-)}$ eine Lösung negativer Energie mit Spin runter.

- *Diracteilchen im elektromagnetischen Feld:*

Die Wechselwirkung eines elektrisch geladenen Dirac-Teilchens mit dem elektromagnetischen Feld wird in minimaler Kopplung beschrieben $(E/c, \vec{p}) \rightarrow (E/c - e\Phi/c, \vec{p} - e\vec{A}) = (p^\mu - eA^\mu)$ bzw

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left[c\vec{\alpha} \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - e\vec{A} \right) + mc^2\beta + e\Phi 1_4 \right] \Psi. \quad (6.19)$$

In den Übungen überzeugen Sie sich, dass auch für (6.19) die Kontinuitätsgleichung (6.11) gilt mit Dichte und Stromdichte wie in (6.12) angegeben.

6.2 Nichtrelativistischer Grenzfall, Pauligleichung

Notiert man den 4-komponentigen Dirac-Spinor in der Form

$$\Psi = \begin{bmatrix} \phi \\ \chi \end{bmatrix} \quad (6.20)$$

worin ϕ, χ 2-komponentige Pauli-Spinoren,

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}, \quad \chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}, \quad (6.21)$$

nimmt (6.19) die Form an

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi = (e\Phi + mc^2) \phi + c\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - e\vec{A}) \chi \quad (6.22)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi = (e\Phi - mc^2) \chi + c\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - e\vec{A}) \phi \quad (6.23)$$

Im feldfreien Fall, $\Phi = 0$, $\vec{A} = 0$, und für ruhendes Teilchen, $\vec{\nabla}\phi = \vec{\nabla}\chi = 0$, lautet die Lösung

$$\phi(\vec{x}, t) = \phi_0 e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t}, \quad \chi(\vec{x}, t) = \chi_0 e^{+\frac{i}{\hbar} E_0 t}. \quad (6.24)$$

worin $E_0 = mc^2$ die Ruheenergie, und ϕ_0, χ_0 konstante Paulispinoren die die Spinpolarisation charakterisieren.

Im nicht-relativistischen Grenzfall erwartet man dass χ verglichen mit ϕ klein ist, die Komponenten ϕ und χ heißen daher die große bzw kleine Komponente.

Spaltet man die schnelle Oszillation ab,

$$\phi(\vec{x}, t) = e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t}\psi(\vec{x}, t), \quad \chi(\vec{x}, t) = e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t}\tilde{\chi}(\vec{x}, t) \quad (6.25)$$

und führt zur Abkürzung den *kinetischen Impuls* ein

$$\vec{\pi} := \vec{p} - e\vec{A}, \quad (6.26)$$

nimmt die Dirac-Gleichung (??) die Form an

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = e\Phi\psi + c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\tilde{\chi} \quad (6.27)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\chi} = -2mc^2\tilde{\chi} + e\Phi\tilde{\chi} + c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\psi. \quad (6.28)$$

Im nichtrelativistischen Grenzfall, also für $mc^2 \gg$ alle relevanten Energien, sind die Zeitskalen in (6.28) klar getrennt: ψ ist eine vornehmlich "langsame" Variable, $\tilde{\chi}$ ist eine vornehmlich "schnelle" Variable (mit Frequenz $-2mc^2/\hbar$). Uns interessiert die Bewegung der langsamen Variable ψ , und die wird durch den – hoffentlich kleinen – langsamen Anteil von $\tilde{\chi}$ getrieben. Setzt man $\tilde{\chi} = \tilde{\chi}_{\text{schnell}} + \tilde{\chi}_{\text{langsam}}$ in Gl. (6.28),

berücksichtigt $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\chi}_{\text{schnell}} \approx -2mc^2\tilde{\chi}_{\text{schnell}}$, findet man⁶,

$$\tilde{\chi}(\vec{x}, t) \approx \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}}{2mc} \psi(\vec{x}, t) \quad (6.29)$$

und die Gleichung für den Spinor ψ liest sich

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left[\frac{1}{2m}(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2 + e\Phi \right] \psi. \quad (6.30)$$

Um mit dem Quadrat $(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2$ fertig zu werden erinnert man sich an die Identität $(\vec{a} \cdot \vec{\sigma})(\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{\sigma}$, und also

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 = \vec{\pi}^2 + i(\vec{\pi} \times \vec{\pi}) \cdot \vec{\sigma}. \quad (6.31)$$

Da $\vec{\pi}$ neben $\vec{A}(\vec{x}, t)$ auch den Differentialoperator $\vec{p} = \hbar\vec{\nabla}$ enthält, ist

$$\vec{\pi} \times \vec{\pi} = \underbrace{\vec{p} \times \vec{p}}_{=0} \times \underbrace{\vec{A}}_{\substack{\hbar(\vec{\nabla} \times \vec{A}) - \vec{A} \times \vec{p} \\ =0}} - e\vec{A} \times \vec{p} + e^2 \underbrace{\vec{A} \times \vec{A}}_{=0} \quad (6.32)$$

$$= ie\hbar\vec{B} \quad (6.33)$$

Infolgedessen

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left[\frac{1}{2m}(\vec{p} - e\vec{A})^2 - \frac{e\hbar}{2m}\vec{\sigma} \cdot \vec{B} + e\Phi \right] \psi \quad (6.34)$$

sog. *Pauli-Gleichung*.

⁶Das skizzierte Verfahren läuft unter dem Begriff der *adiabatischen Elimination*. In den Übungen machen Sie sich mit diesem wichtigen Verfahren vertraut. Eliminiert wird die schnelle Variable; die angegebene Näherung merkt man sich “das langsame ψ versklavt das schnelle $\tilde{\chi}$ ” – oder biblisch: Die Letzten werden die Ersten sein ...

Die Pauli-Gleichung ist Ihnen aus der Vorlesung QM-I bekannt. Im homogenen Magnetfeld $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B}_0 \times \vec{x}$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{2m} (\vec{\ell} + 2\vec{s}) \cdot \vec{B}_0 + e\Phi + \frac{e^2}{2m} \vec{A}^2 \right] \psi \quad (6.35)$$

worin $\vec{\ell} = \vec{x} \times \vec{p}$ (mit $\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$) der kanonische Bahndrehimpuls, und $\vec{s} := \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ der innere Drehimpuls, auch genannt *Drall* bzw. *Spin*. Wegen $\vec{s}^2 = \hbar^2 s(s+1)\mathbb{1}_2$ mit $s = \frac{1}{2}$ beschreibt die Pauli-Gleichung, und also auch die Dirac-Gleichung, Spin-1/2 Teilchen.

Abzulesen hier das magnetische Moment

$$\vec{\mu} \equiv \vec{\mu}_{\text{Bahn}} + \vec{\mu}_{\text{Spin}} = \frac{e}{2m} (\vec{\ell} + 2\vec{s}) . \quad (6.36)$$

Insbesondere der Spinanteil

$$\vec{\mu}_{\text{Spin}} = g \frac{e}{2m} \quad (6.37)$$

worin g das sog. *gyromagnetische Verhältnis*, auch *Lande-Faktor*, nach der Dirac-Theorie offensichtlich $g = 2$.

Dass sich im nichtrelativistischen Grenzfall aus der Dirac-Gleichung die Pauli-Gleichung ableiten lässt, und dass die Dirac-Gleichung insbesondere ein gyromagnetisches Verhältnis $g = 2$ in Übereinstimmung mit den experimentellen Befunden impliziert, hat der Dirac-Gleichung in den Anfangstagen der relativistischen Quantenmechanik zum Durchbruch verholfen. Seitdem regiert sie die Physik der Elementarteilchen, insbesondere der Leptonen und der Quarks.

6.3 Lösungen der freien Diracgleichung

Mit dem Separationsansatz $\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x})e^{-\frac{1}{\hbar}et}$ wird aus der Dirac-Gleichung (6.1) die **stationäre Diracgleichung**

$$\varepsilon\psi(\vec{x}) = \left[\frac{\hbar c}{i} \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + mc^2\beta \right] \psi(\vec{x}). \quad (6.38)$$

wo die Separationskonstante ε die Bedeutung einer Energie.

Da der Dirac-Hamiltonian aus (6.1) mit dem Impulsoperator $\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$ vertauscht – der Impuls ist eine Erhaltungsgröße – suchen wir Lösungen in Form ebener Wellen

$$\psi(\vec{x}) = w \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}}}{\sqrt{V}}, \quad (6.39)$$

worin V das Quantisierungsvolumen, und w ein konstanter Diracspinor. Eingesetzt in (6.38) schauen wir auf das Eigenwertproblem einer 4×4 -Matrix $H_D(\vec{p})$,

$$\varepsilon w = \underbrace{[c\vec{p} \cdot \vec{\alpha} + mc^2\beta]}_{:=H_D(\vec{p})} w. \quad (6.40)$$

das es nun zu lösen gilt.

Notiert man den konstanten Diracspinor w in Form eines Bispinors

$$w = \begin{bmatrix} \phi \\ \chi \end{bmatrix} \quad (6.41)$$

worin ϕ und χ zwei-komponentige Paulispinoren,

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}, \quad \chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}, \quad (6.42)$$

liest sich das Eigenwertproblem (6.40)

$$m c^2 \phi + c \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \chi = \varepsilon \phi, \quad (6.43)$$

$$c \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \phi - m c^2 \chi = \varepsilon \chi. \quad (6.44)$$

Umstellen von (6.44) liefert $\chi = \frac{c \vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{\varepsilon + m c^2} \phi$, dies in (6.43) eingesetzt, unter Berücksichtigung von $(\vec{p} \cdot \vec{\sigma})^2 = \vec{p}^2 = m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2$ bzw.

$$\varepsilon_{\pm} = \pm E(\vec{p}), \quad E(\vec{p}) = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2}. \quad (6.45)$$

Das Energiespektrum der freien Diracgleichung zerfällt demnach in zwei Kontinua, eines oberhalb $m c^2$, das andere unterhalb $-m c^2$. Der Hamiltonoperator der Diracschen Wellenmechanik ist nicht definit, d. h. er ist weder von unten noch von oben beschränkt.⁷ Die Interpretation der Lösungen zu negativer Energie verschieben wir auf später (vgl. Kapitel zu Diracs Löchertheorie).

Amplitudenspinoren w zu positiver Energie $\varepsilon_+ = +E(\vec{p})$, notiert mit dem Buchstaben u , und Amplitudenspinoren zu negativer Energie $\varepsilon_- = -E(\vec{p})$, notiert mit dem Buchstaben v , sind Bispinoren von der Form

$$u_{\vec{p}} = F \begin{bmatrix} \eta \\ G \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \eta \end{bmatrix}, \quad v_{\vec{p}} = F \begin{bmatrix} -G \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \eta' \\ \eta' \end{bmatrix}. \quad (6.46)$$

wo $G \equiv G(\vec{p})$ mit

$$G(\vec{p}) = \frac{c}{E(\vec{p}) + m c^2} \quad (6.47)$$

⁷Erst in einer quantenfeldtheoretischen Reformulierung, bei der das Dirac-Feld mittels Antikommutatoren quantisiert wird, wird diese Anomalie beseitigt und der resultierende Hamiltonian ist definit (von unten beschränkt).

und η, η' beliebige Paulispinoren, normiert $\eta^\dagger \eta = \eta'^\dagger \eta' = 1$. Der Vorfaktor $F \equiv F(\vec{p})$

$$F(\vec{p}) = \sqrt{\frac{E(\vec{p}) + mc^2}{2E(\vec{p})}} \tag{6.48}$$

garantiert die Normierung $u_{\vec{p}}^\dagger u_{\vec{p}} = v_{\vec{p}}^\dagger v_{\vec{p}} = 1$. Orthogonalität der Amplitudenspinoren zu positiver und negativer Energie ist wegen Hermitizität von $H_D(\vec{p})$ automatisch garantiert, $u_{\vec{p}}^\dagger v_{\vec{p}} = v_{\vec{p}}^\dagger u_{\vec{p}} = 0$.

Die Eigenwerte $\epsilon_\lambda, \lambda = \pm$, sind jeweils zweifach entartet. Jeder Paulispinor – und damit jeder, nach dem Vorzeichen der Energie unterschiedener Amplitudenspinor – ist Linearkombination zweier, nach Gesichtspunkten der Zweckmäßigkeit gewählter, linear unabhängiger Paulispinoren. Beliebt ist die kanonische Basis

$$\eta_\uparrow := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \eta_\downarrow := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{6.49}$$

Mit dieser Wahl und der Abkürzung $p_\pm = p_x \pm ip_y$ sind die stationären Lösungen der Diracgleichung zu positiver Energie gegeben

$$\psi_{\vec{p}\uparrow}^{(+)}(\vec{x}, t) = F \underbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ Gp_z \\ Gp_+ \end{bmatrix}}_{u_{\vec{p}\uparrow}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x} - \frac{i}{\hbar}Et} \sqrt{V}, \quad \psi_{\vec{p}\downarrow}^{(+)}(\vec{x}, t) = F \underbrace{\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ Gp_- \\ -Gp_z \end{bmatrix}}_{u_{\vec{p}\downarrow}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x} - \frac{i}{\hbar}Et} \sqrt{V}, \tag{6.50}$$

und die stationären Lösungen zu negativer Energie

$$\psi_{\vec{p}\uparrow}^{(-)}(\vec{x}, t) = F \underbrace{\begin{bmatrix} -Gp_z \\ -Gp_+ \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}}_{v_{\vec{p}\uparrow}} \underbrace{\begin{bmatrix} -Gp_- \\ Gp_z \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}}_{v_{\vec{p}\downarrow}} = F \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x} + \frac{i}{\hbar}Et}}{\sqrt{V}}, \quad \psi_{\vec{p}\downarrow}^{(-)}(\vec{x}, t) = F \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x} + \frac{i}{\hbar}Et}}{\sqrt{V}}. \quad (6.51)$$

Die hier angeführten Amplitudenspinoren sind orthonormal,

$$u_{\vec{p}s}^\dagger u_{\vec{p}s'} = \delta_{ss'}, \quad v_{\vec{p}s}^\dagger v_{\vec{p}s'} = \delta_{ss'}, \quad u_{\vec{p}s}^\dagger v_{\vec{p}s'} = v_{\vec{p}s}^\dagger u_{\vec{p}s'} = 0, \quad (6.52)$$

und vollständig,

$$u_{\vec{p}\uparrow} u_{\vec{p}\uparrow}^\dagger + u_{\vec{p}\downarrow} u_{\vec{p}\downarrow}^\dagger + v_{\vec{p}\uparrow} v_{\vec{p}\uparrow}^\dagger + v_{\vec{p}\downarrow} v_{\vec{p}\downarrow}^\dagger = 1_4 \quad (6.53)$$

Mit der Wahl (6.49) werden die Zustände (6.50) und (6.51) nach der Spinpolarisation ruhender Teilchen in z -Richtung sortiert: in der Standarddarstellung (6.8) von $\vec{\Sigma}$, Gl. (6.15), sind $u_{0\uparrow}$ und $v_{0\uparrow}$ Eigenzustände von Σ_z zum Eigenwert $+1$, $u_{0\downarrow}$ und $v_{0\downarrow}$ sind Eigenzustände von Σ_z zum Eigenwert -1 .

Für bewegte Teilchen ist diese Klassifikation zwar erschöpfend, aber nicht unbedingt sinnvoll – gegenüber all den Richtungen, in denen sich das Teilchen bewegen kann, ist die z -Richtung durch nichts ausgezeichnet. Die ausgezeichnete Richtung ist vielmehr die Bewegungsrichtung $\vec{p}/|\vec{p}|$, und so kann es nicht verwundern, dass die Spinprojektion in Bewegungsrichtung, genannt *Helizität*,

$$h(\vec{p}) := \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|} \cdot \vec{\Sigma}, \quad (6.54)$$

gerne zur Klassifikation bewegter Teilchen herangezogen wird. In der Tat vertauscht die Helizität $h(\vec{p})$ mit der Hamiltonmatrix $H_D(\vec{p})$, d.h. $h(\vec{p})$ und $H_D(\vec{p})$ lassen sich gemeinsam diagonalisieren. Parametrisieren wir $\vec{p}/|\vec{p}| = (\cos\varphi \sin\vartheta, \sin\varphi \sin\vartheta, \cos\vartheta)$,

führen an dieser Stelle helikale Pauli-Spinoren ein,

$$\eta_+(\vec{p}) = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos(\vartheta/2) \\ e^{i\varphi/2} \sin(\vartheta/2) \end{pmatrix}, \quad \eta_-(\vec{p}) = \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi/2} \sin(\vartheta/2) \\ e^{i\varphi/2} \cos(\vartheta/2) \end{pmatrix}. \quad (6.55)$$

bestätigen $\vec{p} \cdot \vec{\sigma} \eta_+(\vec{p}) = +|\vec{p}| \eta_+(\vec{p})$, $\vec{p} \cdot \vec{\sigma} \eta_-(\vec{p}) = -|\vec{p}| \eta_-(\vec{p})$, lassen sich die Eigen-spinoren zu gegebenem Impuls \vec{p} , Energie $\varepsilon = \pm E$ und Helizität \pm angeben. Helizität ist allerdings nur für masselose Teilchen eine absolute Teilcheneigenschaft. Massive Teilchen lassen sich durch einen Wechsel des Bezugssystems “überholen”, so dass aus \vec{p} -Teilchen $-\vec{p}$ -Teilchen werden, und somit die Helizität beispielsweise von $+$ nach $-$ wechselt.

6.4 Löchertheorie

Versucht man die Zustände negativer Energie im üblichen Sinne einer Ein-Teilchen Schrödingertheorie zu deuten, sieht man sich mit Problemen konfrontiert, die durch die Erfahrung nicht gedeckt sind:

- Neg-E Teilchen vermindern ihre kinetische Energie durch Impulsaufnahme. Durch Energieabgabe werden Sie schneller, nicht langsamer.
- Neg-E Elektronen fühlen sich von Protonen abgestoßen, nicht angezogen.

Andererseits können die Neg-E Zustände nicht einfach aus der Theorie ausgeschlossen werden, da die Pos-E Zustände nicht vollständig, jedes genügend lokalisierte Wellenpakete notwendig auch Neg-E Komponenten aufweist, und im übrigen Pos-E Elektronen durch Strahlungsübergang in Neg-E Zustände übergehen können.

Diracs Vorschlag mit diesem Dilemma fertig zu werden,⁸

- (1) Dirac-Teilchen unterliegen dem Paulischen Ausschließungsprinzip, wonach keine zwei Fermionen ein-und-denselben Zustand besetzen können.
- (2) Im Grundzustand – dem sog. Vakuumzustand – sind alle Neg-E Zustände jeweils mit genau einem Teilchen besetzt und alle Pos-E Zustände sind unbesetzt.

Im Grundzustand G sind alle Zustände negativer Energie einfach besetzt. Die Gesamtenergie in diesem Zustand ist dann $E_G = -\sum_{(\vec{p},s)} E(\vec{p})$. Im Zustand L , in dem alle ein-Teilchen Zustände negative Energie bis auf einen Einteilchenzustand mit Quantenzahlen $(-E(\vec{p}_0), \vec{p}_0, s_0)$ besetzt sind, ist die Energie etwas größer, $E_L = -\sum_{(\vec{p},s) \neq (\vec{p}_0, s_0)} E(\vec{p}) + E(\vec{p}_0)$. Ähnlich die Gesamtladung Q , Gesamtimpuls \vec{P} und Spinpolarisierung S . Im Grundzustand $Q_G = \sum_{(\vec{p},s)} e$, im Zustand L hingegen $Q_L = \sum_{(\vec{p},s) \neq (\vec{p}_0, s_0)} e = Q_G - e$. Ist also im ansonsten vollen Diracsee der negativen Energiezustände ein Zustand mit Quantenzahlen $(-E(\vec{p}), -\vec{p}, -s, -e)$ unbesetzt entspricht das einem besetzten Zustand mit Quantenzahlen $(+E(\vec{p}), +\vec{p}, +s, +e)$ – angesichts $E > 0$ ist das der Zustand eines realen Teilchens!

Ein Neg-E Elektron des Diracsees kann Strahlung absorbieren, und dadurch in einen Pos-E Zustand übergehen. Beobachtet würde dann ein Elektron im üblichen Sinne (Ladung $-|e_0|$, Energie $+E$), und ein Loch im Diracsee, das relativ zum intakten See als Anwesenheit eines Teilchens der Ladung $+|e_0|$ und der Energie $+E$ wahrgenommen würde. Das hier von Dirac erstmals postulierte neue Teilchen wurde kurze Zeit

⁸P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. (London), **A 126**, 360 (1930). Vgl. auch J. R. Oppenheimer, Phys. Rev. **35**, 939 (1930).

später in der Höhenstrahlung nachgewiesen, und fungiert heutzutage unter dem Namen "Positron". Im Sinne der Diracschen Löchertheorie sind Positronen unbesetzte Neg-E Zustände im Diracsee der Elektronen.⁹

Die Vernichtung eines Neg-E Elektrons wird mit der Erzeugung eines Pos-E Positrons identifiziert. Elektron und Positron bilden ein "Teilchen – Antiteilchen" Paar. Konventionsgemäß wird das Elektron als "Teilchen" und das Positron als "Antiteilchen" des Elektrons aufgefasst. Ebenso gut könnte man aber auch das Positron als Teilchen, und das Elektron als Antiteilchen des Positrons auffassen. Zu beachten ist hier lediglich, dass sowohl Teilchen als auch Antiteilchen immer "pos-E" meint, beide Partner die gleiche Masse und den gleichen Spin haben.

⁹Haben Sie einen Gartenzaun dem eine Latte fehlt, haben Sie ein Loch. Sitzt das Loch rechts, und Sie wollen es aus ästhetischen Gründen nach links bringen, müssen Sie die Latten im Zaun nach rechts verschieben. PhysikerInnen würden sagen "nach links laufende Löcher sind nach rechts laufende Zaunlatten".

Der Transport des Loches (nach links) ist übrigens mit Impuls verbunden (nach rechts). Davon überzeugt man sich, wenn man sich beim Transport des Loches die Finger klemmt. Obwohl ein Loch also eigentlich ein "Nicht-Daseiendes" ist, kann man sich an ihm verletzen: das "Nicht-Daseiende" ist ein ziemlich handfestes Etwas. Das ist im wesentlichen die Löchertheorie nach Dirac. Freie Latten, also Latten, die nicht im Gartenzaun gebunden sind, sind Elektronen im üblichen Sinne. Der Gartenzaun ist der Diracsee, und Zaunlatten sind die Elektronen negativer Energie. Löcher im Gartenzaun sind die Positronen.

Wie kommt das Loch in den Zaun? Indem eine Latte aus dem Zaun entfernt wird. Die Geburt des Lochs, verbunden mit der Geburt einer freien Latte, fällt mit dem Tod einer Latte im Gartenzaun zusammen. Wird der Zaun später repariert, indem die freie Latte wieder eingesetzt wird, verschwindet das Loch. Der Tod eines Loches, verbunden mit dem Tod einer freien Latte, fällt mit der (Wieder-)Geburt einer Gartenzaun-Latte zusammen. Das Loch und freie Latte (Positron und Elektron) folgen hier der Konvention "erst geboren dann gestorben". Die entnommene Gartenzaun-Latte stirbt als Element des Gartenzauns bevor sie (wieder-)geboren wird: Sie entwickelt sich zeitlich rückwärts.

Prozesse wie die Vernichtung oder Erzeugung von Teilchen können im Rahmen einer Ein-Teilchen Quantenmechanik naturgemäß nicht ohne weiteres beschrieben werden, bedürfen also einer (relativistischen) Vielteilchentheorie. In der Quantenelektrodynamik, unter Eingeweihten QED, wird diese Theorie, aufbauend auf der Diracgleichung und den Maxwell'schen Gleichungen, formuliert und mit großem Erfolg angewendet. Die Formulierung folgt zwar den bereits vertrauten Pfaden, ist aber ein wenig fummelig, weshalb wir sie auf später verschieben.

Es zeigt sich nämlich, dass auch die Dirac'sche Wellenmechanik dank der oben angesprochene "Teilchen-Antiteilchen Symmetrie" bestimmte nicht-triviale Prozesse der Quantenelektrodynamik – dazu gehört insbesondere die Paar-Erzeugung und -Vernichtung – perfekt beschreiben kann.

Ausgangspunkt ist die relativistische Bewegungsgleichung einer Punktladung im elektromagnetischen Feld,

$$m \frac{d^2 x^\mu}{d\tau^2} = e F^\mu{}_\nu \frac{dx^\nu}{d\tau}. \quad (6.56)$$

Kehrt man hier die Eigenzeit τ um, $\tau \mapsto \tau' = -\tau$ (das Teilchen propagiert nun mit wachsendem τ' gemessen an Fortschritt von τ "zeitlich rückwärts"), so läuft das auf gleiche hinaus wie ein Vorzeichenwechsel der Ladung, $e \mapsto -e$ für ein vorwärts propagierendes Teilchen. Kurz: ein Elektron mit Ladung $e = -e_0$, das zeitlich rückwärts propagiert ist von einem Positron mit Ladung $e = +e_0$, das zeitlich vorwärts propagiert, nicht zu unterscheiden.

Im Rahmen der Löchertheorie: Wird bei \bar{x}_1 zur Zeit t_1 ein Positron erzeugt, das dann bei x_2 zu einer späteren Zeit $t_2 > t_1$ wieder vernichtet wird, so kann das auch gelesen werden: zur Zeit t_2 wird ein Neg-E Elektron erzeugt, das zur Zeit $t_1 < t_2$ vernichtet wurde. Positronen sind Elektronen, die sich raumgespiegelt rückwärts in der Zeit entwickeln. Das ist im wesentlichen die Interpretation der Neg-E Lösungen

nach Stückelberg und Feynman.¹⁰

6.5 Ladungskonjugation

Positronen sind Teilchen wie Du und ich. Von Elektronen unterscheiden sie sich nur in ihrer elektrischen Ladung: wo Elektronen mit der Ladung $e = -e_0$ daher kommen, kommen Positronen mit der Ladung $e = +e_0$ daher. Genügt also die WF eines Elektrons Ψ der Diracgleichung (6.19), sollte die WF eines Positrons – hier bezeichnet Ψ_C – einer Diracgleichung genügen, die sich nur im Vorzeichen von e von (6.19) unterscheidet,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_C = \left[c\vec{\alpha} \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + e\vec{A} \right) + mc^2\beta - e\Phi 1_4 \right] \Psi_C. \quad (6.57)$$

Gemäß Löchertheorie sollte jede neg-E Lösungen der Diracgleichung (6.19) einer bestimmten pos-E Lösung von (6.57) zugeordnete werden können. M.a.W die Löchertheorie postuliert eine Abbildung $\Psi \mapsto \Psi_C$ unter der die neg-E Lösungen von (6.19) auf pos-E Lösungen von (6.57) abgebildet werden.

Die fragliche Abbildung muss insbesondere das relative Vorzeichen der Ableitungen und Potentiale wechseln. Am einfachsten wird dies durch komplex-Konjugation von (6.19) erreicht,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* = \left[c\vec{\alpha}^* \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + e\vec{A} \right) - mc^2\beta - e\Phi 1_4 \right] \Psi^*. \quad (6.58)$$

Um abschließend noch das Vorzeichen des Masseterms zu reparieren und die Komplex-Konjugation der α rückgängig zu machen suchen wir eine Ähnlichkeitstrafo $\alpha^* \mapsto$

¹⁰E.C.G. Stückelberg, Helv. Phys. Acta **14.32L**, 588 (1941); R.P. Feynman, Phys. Rev. **76**, 769 (1949) auf der die Definition des sog. *Feynman-Propagators* der Dirac-Theorie beruht.

$\alpha = C\alpha^*C^{-1}$, $\beta \mapsto -\beta = C\beta C^{-1}$, womit dann $\Psi_C = C\Psi^*$. Normerhaltung bedeutet, dass C unitär, $C^\dagger = C^{-1}$. In der Standarddarstellung ist lediglich α^2 von der Komplex-Konjugation betroffen, $\alpha^{2*} = -\alpha^2$, und so verwundert es nicht, dass die fragliche Ähnlichkeitstrafo $C = \eta_C\beta\alpha^2$, mit der Wahl $\eta_C = i$ für den zunächst beliebigen Phasenfaktor

$$\Psi_C(\vec{x}, t) = i\beta\alpha^2\Psi^*(\vec{x}, t). \quad (6.59)$$

wobei

$$i\beta\alpha^2 = i \begin{bmatrix} 0 & \sigma^2 \\ -\sigma^2 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.60)$$

Die Ladungskonjugation eines neg-E mit ‘‘Spin rauf’’ liefert

$$\Psi(\vec{x}, t) = W \begin{bmatrix} -Gp_z \\ -Gp_+ \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x} + \frac{i}{\hbar}Et}} \Psi_C(\vec{x}, t) = -W \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -Gp_- \\ Gp_z \end{bmatrix} \xrightarrow{\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x} - \frac{i}{\hbar}Et}}}{\sqrt{V}}} \quad (6.61)$$

kurz: Impuls-Umkehr, Energie-Umkehr, Spin-Umkehr. Zusammen mit der Ladungsumkehr also genau wie in der Löchertheorie vorgesehen.

Parität $\Psi(\vec{x}, t) \mapsto \Psi_P(\vec{x}, t) = \eta_P\beta\Psi(-\vec{x}, t)$

Zeitumkehr $\Psi(\vec{x}, t) \mapsto \Psi_T(\vec{x}, t) = \eta_T T\Psi(\vec{x}, -t)^*$ mit $T = -i\alpha^1\alpha^3 = -i\gamma^5 C$.

$\Psi_{PCT}(\vec{x}, t) = i\gamma^5\Psi(-\vec{x}, -t)$.

Positronen sind Elektronen die sich raumspiegelt rückwärts in der Zeit bewegen.

6.6 Propagator

$$(i\hbar\partial_t - \hat{H}_0) |\Psi\rangle = \hat{V} |\Psi\rangle \quad (6.62)$$

$$\hat{H}_0 = c\vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{p}} + mc^2\beta, \quad \hat{V} = e(\Phi - c\vec{\alpha} \cdot \vec{A}) \quad (6.63)$$

Integralgleichung für $|\Psi\rangle$

$$|\Psi(t)\rangle = |\phi(t)\rangle + \int dt' \hat{G}_0(t, t') \hat{V}(t') |\Psi(t')\rangle \quad (6.64)$$

mit $\hat{G}_0(t, t')$ Greensfunktion der freien Gleichung

$$(i\hbar\partial_t - \hat{H}_0) \hat{G}_0(t, t') = \delta(t - t') \quad (6.65)$$

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_0^{(+)} + \hat{H}_0^{(-)} \quad (6.66)$$

$$\hat{H}_0^{(+)} = \sum_{\vec{p}, s} E(\vec{p}) |\phi_{\vec{p}, s}^{(+)}\rangle \langle \phi_{\vec{p}, s}^{(+)}| \quad (6.67)$$

$$\hat{H}_0^{(-)} = - \sum_{\vec{p}, s} E(\vec{p}) |\phi_{\vec{p}, s}^{(-)}\rangle \langle \phi_{\vec{p}, s}^{(-)}| \quad (6.68)$$

Mit Feynmann-Randbedingungen “pos-E vorwärts, neg-E rückwärts in der Zeit”

$$\hat{G}_0(t, t') = -i\hbar\theta(t-t') \sum_{\vec{p}, s} |\phi_{\vec{p}, s}^{(+)}\rangle \langle \phi_{\vec{p}, s}^{(+)}| e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t')} + i\hbar\theta(t'-t) \sum_{\vec{p}, s} |\phi_{\vec{p}, s}^{(-)}\rangle \langle \phi_{\vec{p}, s}^{(-)}| e^{+\frac{i}{\hbar}E(t-t')} \quad (6.69)$$

Streuwelle

$$|\Psi(t)\rangle - |\phi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \sum_{\vec{p},s} |\phi_{\vec{p},s}^{(+)}(t)\rangle \int_{-\infty}^t dt' \langle \phi_{\vec{p},s}^{(+)}(t') | \hat{V}(t') | \Psi(t') \rangle \quad (6.70)$$

$$+ \frac{i}{\hbar} \sum_{\vec{p},s} |\phi_{\vec{p},s}^{(-)}(t)\rangle \int_t^{\infty} dt' \langle \phi_{\vec{p},s}^{(-)}(t') | \hat{V}(t') | \Psi(t') \rangle, \quad (6.71)$$

enthält in der fernen Zukunft nur pos-E, in der fernen Vergangenheit nur neg-E Komponenten.

$$S_{fi} = \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar} \epsilon_f \int_{-\infty}^{\infty} dt' \langle \phi_f(t') | \hat{V}(t') | \Psi_i(t') \rangle, \quad (6.72)$$

worin ϕ_f freie Welle mit Quantenzahlen f , ϵ_f das Energievorzeichen von ϕ_f , und $|\Psi_i\rangle$ Lsg der Diracgleichung mit Quantenzahlen i , die entweder in der fernen Vergangenheit pos-E, oder in der fernen Zukunft neg-E.

Mott-Streuung ist die elastische Streuung eines Spin- $\frac{1}{2}$ Elektrons an einer statischen, punktförmigen Ladung Ze ohne Spin, also reine Coulombwechselwirkung $\vec{A} = 0$ und

$$\hat{V}(\vec{x}) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{x}|}. \quad (6.73)$$

Einfallendes Elektron in der fernen Vergangenheit $\phi_{\vec{p}_i, s_i}^{(+)}(\vec{x}, t)$. Wirkungsamplitude für

die Streuung in freien Zustand $\phi_{\vec{p}_f, s_f}^{(+)}(\vec{x}, t)$ in Born'scher Näherung

$$S_{fi} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \phi_{\vec{p}_f, s_f}^{(+)}(t') | \hat{V}(t') | \phi_{\vec{p}_i, s_i}^{(+)}(t') \rangle \quad (6.74)$$

$$= iZ \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar}}_{=\alpha c} \frac{1}{V} (u_{\vec{p}_f, s_f} | u_{\vec{p}_i, s_i}) \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)t}}_{=2\pi\hbar\delta(E_f - E_i)} dt \underbrace{\int e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_f - \vec{p}_i) \cdot \vec{x}} \frac{1}{|\vec{x}|} d^3x}_{=\frac{4\pi\hbar^2}{|\vec{p}_f - \vec{p}_i|^2}} \quad (6.75)$$

$$= i8\pi^2 Z \alpha \frac{c\hbar^3}{V |\vec{p}_f - \vec{p}_i|^2} (u_{\vec{p}_f, s_f} | u_{\vec{p}_i, s_i}) \delta(E_f - E_i) \quad (6.76)$$

Mit $V d^3p_f / (2\pi\hbar)^3$ die Zahl der Zustände gegebener Spinpolarisation s_f und Impuls in einem bei \vec{p}_f zentrierten Volumchen d^3p_f , ist die W'keit für die Streuung in einen dieser Zustände gegeben

$$w_{\{f\} \leftarrow i} = |S_{fi}|^2 \frac{V d^3p_f}{(2\pi)^3} \quad (6.77)$$

$$= 4Z^2 \frac{\alpha^2 \hbar^2 c^2}{V |\vec{p}_f - \vec{p}_i|^4} |(u_{\vec{p}_f, s_f} | u_{\vec{p}_i, s_i})|^2 T \delta(E_f - E_i) d^3p_f \quad (6.78)$$

wobei – wie in der üblichen Ableitung von Fermi's Goldener Regel – die Substitution $[2\pi\hbar\delta(E_f - E_i)]^2 \mapsto 2\pi\hbar T \delta(E_f - E_i)$, vorgenommen wurde, wobei T die Wechselwirkungszeit.¹¹

Die W'keit (), dividiert durch die Wechselwirkungszeit T , gibt die Rate für die Streuung $\vec{p}_i \rightarrow \vec{p}_{\{f\}}$ in den um die Richtung \vec{p}_f zentrierten Raumwinkel $d\Omega$. Diese

¹¹Das Zeitintegral in Gl. (), für endliche Wechselwirkungszeit T liest sich $\int_{-T/2}^{T/2} e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)t} dt = 2 \frac{\sin((E_f - E_i)T/(2\hbar))}{(E_f - E_i)/\hbar}$. Für großes, aber endliches T , ist das Quadrat – als Funktion von $E_f - E_i$ – eine bei E_i scharf lokalisierte Funktion mit Integral $2\pi\hbar T$.

Rate, dividiert durch den Betrag der Stromdichte der einfallenden Teilchen, gibt den differentiellen Streuquerschnitt $d\sigma$. Die Stromdichte der einfallenden Teilchen \vec{j}^{in} ist nach () gegeben $\vec{j}^{\text{in}} = c u_{\vec{p}_i, s_i}^\dagger \vec{\alpha} u_{\vec{p}_i, s_i}$, mit der hier vorgenommenen Normierung $|\vec{j}^{\text{in}}| = |\vec{v}_i|/V$, wo $\vec{v}_i = c^2 \vec{p}_i / E_i$ die Geschwindigkeit der einfallenden Teilchen. Daher

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4Z^2 \alpha^2 \frac{\hbar^2 E_i^2}{c^2 |\vec{p}_f - \vec{p}_i|^4} |(u_{\vec{p}_f, s_f} | u_{\vec{p}_i, s_i})|^2 \quad (6.79)$$

Angesichts

$$|\vec{p}_f - \vec{p}_i|^4 = (\vec{p}_f^2 + \vec{p}_i^2 - 2\vec{p}_f \cdot \vec{p}_i)^2 = 4\vec{p}^4 (1 - \cos\vartheta)^2 = 16\vec{p}^4 \sin^4(\vartheta/4) \quad (6.80)$$

also

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 \alpha^2 \hbar^2}{4\vec{p}^2 \beta^2 \sin^4(\vartheta/2)} \underbrace{|(u_{\vec{p}_f, s_f} | u_{\vec{p}_i, s_i})|^2}_{=1-\beta^2 \sin^2(\vartheta/2)} \quad (6.81)$$

wobei die unterbrace nach Mittelung über die Polarisation im Eingangskanal und Blindheit des Detektors gegenüber Spinpolarisation im Ausgangskanal.

6.7 Aufgaben

▷ **Aufgabe 6-1** Für Zeiten $t < 0$ reise ein Teilchen im Zustand positiver Energie mit Spinpolarisation in z -Richtung in x -Richtung. Zum Zeitpunkt $t = 0$ wird ein konstantes Potential \vec{A} mit Komponente nur in z -Richtung eingeschaltet, das zur Zeit $t = T$ wieder ausgeschaltet wird. Man berechne die W'keit, das sich das Teilchen zum Zeitpunkt T in einem Zustand negativer Energie befindet.