§3 Diracgleichung

Die DIRACgleichung ist wie die SCHRÖDINGERgleichung eine partielle Differentialgleichung, die nur eine Ableitung ∂_t von erster Ordnung in der Zeit hat

$$i\,\hbar\,\partial_t\chi = \left(-i\,c\,\hbar\,(\alpha_x\,\partial_x + \alpha_y\,\partial_y + \alpha_z\,\partial_z) + \beta\,m\,c^2\right)\chi\ . \tag{1}$$

Es gibt auch nur Ortsableitung ∂_x, ∂_y, ∂_z von erster Ordnung. Der *Trick* ist, daß man ein System von partiellen Differentialgleichungen hat. Die Größen α_x, α_y, α_z, β sind 4×4–Matrizen die auf die vierkomponentige Wellenfunktion $\chi = (\chi_1,\,\chi_2,\,\chi_3,\,\chi_4)$ wirken. Der HAMILTONoperator H_d der DIRACgleichung hat also die Form

$$H_D\ =\ c\,(\vec{\alpha}\cdot\vec{p})\ +\ \beta\,m\,c^2 \tag{2}$$

mit $\vec{p} = (\hbar/i)\,\nabla$. Die relativistischen Energie–Impuls–Beziehung mit der Form $E^2 = (c\,\vec{p})^2 + (m\,c^2)^2$ muß in (2) enthalten sein. Dies läßt sich mit folgenden Bedingungen an die Matrizen α_i und β erreichen:

$$\begin{aligned} \alpha_i\,\beta\ +\ \beta\,\alpha_i\ &= 0 \quad \text{für } i = 1,\,2,\,3 \\ \alpha_i\,\alpha_j + \alpha_j\,\alpha_i &= 0 \quad \text{für } i \neq j \\ \alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = \beta^2 &= 1\ \ , \end{aligned} \tag{3}$$

Wendet man den DIRACoperator von (1) oder (2) zweimal auf die Wellenfunktion χ an, dann verschwinden mit (3) alle *gemischten* Ausdrücke wie $\partial_x\partial_y\,(\alpha_x\alpha_y + \alpha_y\alpha_x)$ und $\partial_x\,mc^2(\alpha_x\beta + \beta\,\alpha_x)$ und nur die *erwünschten* Terme wie $(\alpha_x\,\partial_x)^2 = \partial_x^2$ oder $(\beta\,mc^2)^2 = (mc^2)^2$ bleiben übrig. Aus (1) wird also

$$-\hbar^2\,\partial_t^2\,\chi = \left(-\hbar^2 c^2\,(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2)\ +\ (m\,c^2)^2\right)\chi\ . \tag{4}$$

Mit anderen Worten, alle Komponenten der Wellenfunktion χ genügen der KLEIN–GORDONgleichung.

Nach demselben Konstruktionsprinzip ist die WEYLgleichung aufgebaut. Weil die Masse $m = 0$ ist, braucht man nur drei *antivertauschende* Matrizen statt vier bei der DIRACgleichung. Statt (1) ergibt sich

$$i\,\hbar\,\partial_t\tilde{\chi} = -i\,c\,\hbar\,(\sigma_x\,\partial_x + \sigma_y\,\partial_y + \sigma_z\,\partial_z)\,\tilde{\chi}\ . \tag{5}$$

Es genügen die drei PAULImatrizen σ_x, σ_y, σ_z, die auf ein zweikomponentiges $\tilde{\chi} = (\tilde{\chi}_1,\,\tilde{\chi}_2)$ einwirken. Da

$$\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 0 \quad \text{für } i \neq j \quad \text{und} \quad \sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = 1 \tag{6}$$

ist, wird aus (5) durch zweimaliges Differenzieren nach der Zeit

$$-\hbar^2\,\partial_t^2\,\tilde{\chi} = -\hbar^2 c^2\,(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2)\,\tilde{\chi}\ . \tag{7}$$

so daß wieder jede der beiden Komponenten $\tilde{\chi}_1$ und $\tilde{\chi}_2$ der KLEIN–GORDONgleichung ohne Masse genügen.

Die Matrizen α_i und β lassen sich durch die drei PAULImatrizen σ_i und die 2×2–Einheitsmatrix I bilden:

$$\alpha_i = \sigma_1 \otimes \sigma_i \quad \text{und} \quad \beta = \sigma_3 \otimes I \tag{8}$$

mit

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \;, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \;, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \;, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \;. \tag{9}$$

Das Symbol $\otimes$ bedeutet das Tensorprodukt. Also aus einem zweidimensionalen Raum in dem die Paulimatrizen "wirken" wird durch Produktbildung aus zwei Vektoren bzw. Spinoren $\big(\chi(1)_\uparrow,\, \chi(1)_\downarrow\big)$ und $\big(\chi(2)_\uparrow,\, \chi(2)_\downarrow\big)$ eine vierkomponentige Größe $\big(\chi(1)_\uparrow\chi(2)_\uparrow,\, \chi(1)_\uparrow\chi(2)_\downarrow,\, \chi(1)_\downarrow\chi(2)_\uparrow,\, \chi(1)_\downarrow\chi(2)_\downarrow\big)$. Eigentlich ist es eine zweifach indizierte Größe, die man deshalb als Tensor zweiter Stufe bezeichnen könnte. Aber sie wird als Vektor aufgefaßt auf die Matrix β nimmt dann folgende Gestalt an

$$\beta = \sigma_3 \otimes I = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \;, \tag{10a}$$

wobei σ_3 auf den Spinor $\chi(1)$ und I auf den Spinor $\chi(2)$ wirken. Entsprechend kann man die Matrix $\alpha_1 = \sigma_1 \otimes \sigma_1$ "auswickeln"

$$\alpha_1 = \sigma_1 \otimes \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{10b}$$

und man sieht, wie sich die Standarddarstellung der α–Matrizen hinter der Tensorproduktnotation $\alpha_i = \sigma_1 \otimes \sigma_i$ verbirgt.

Mit der tensoriellen Notation läßt sich einfach rechnen:

$$\begin{aligned} \alpha_1 \cdot \alpha_2 &= \big(\sigma_1 \otimes \sigma_1\big) \cdot \big(\sigma_1 \otimes \sigma_2\big) = (\sigma_1 \cdot \sigma_1) \otimes (\sigma_1 \cdot \sigma_2) = \quad i\, I \otimes \sigma_3 = \quad i\, \sigma_3' \\ \alpha_2 \cdot \alpha_1 &= \big(\sigma_1 \otimes \sigma_2\big) \cdot \big(\sigma_1 \otimes \sigma_1\big) = (\sigma_1 \cdot \sigma_1) \otimes (\sigma_2 \cdot \sigma_1) = -i\, I \otimes \sigma_3 = -i\, \sigma_3' \end{aligned}$$

Man muß nur beachten, daß die Matrixmultiplikation nur mit Matrizen der gleichen Position (vor $\otimes$ oder hinter $\otimes$) ausgeführt wird. Man sieht also sofort, daß $\alpha_1\alpha_2 + \alpha_2\alpha_1 = 0$ ist. Die anderen Relationen in (2) lassen sich ebenso einfach nachrechnen. Die letzten beiden Gleichungen lassen sich als

$$\alpha_1\alpha_2 - \alpha_2\alpha_1 = 2\, i\, \sigma_3' \quad \text{mit } \sigma_3' = I \otimes \sigma_3 = \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{11}$$

zusammenfassen, wobei eine vierdimensionale Version der Spinmatrix mit einem Strich σ' im Unterschied zur Paulischen Form (4) benutzt wird. Eine Variante dieser Gleichung

$$\alpha_1\sigma_2' - \sigma_2'\alpha_1 = 2\, i\, \alpha_3 \tag{12}$$

und die durch zyklische Vertauschung der Indizes analogen sind für den Abschnitt danach wichtig, der Spin und Drehimpuls behandelt.

a) Drehimpuls und Spin

Der Drehimpulsoperator $\vec{L} = \frac{\hbar}{i}\left(\vec{r}\times\nabla\right)$ vertauscht nicht mit H_d von (2), wie gleich gezeigt wird. Wie in der SCHRÖDINGERschen Quantenmechanik kann man die Zeitabhängigkeit von Operatoren bzw. deren Ableitung nach der Zeit durch

$$\frac{\partial O}{\partial t} = \frac{1}{i\,\hbar}\left[\,O,\,H_d\,\right] \tag{13}$$

berechnen. Die Änderung des Ortsoperators $\vec{r}$, ist damit

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{i\,\hbar}\left[\,\vec{r},\,H_D\right] \;=\; c\,\vec{\alpha}\;, \tag{14}$$

was ein merkwürdiges Ergebnis ist, denn die Eigenwerte von α_i sind ± 1, so daß man sich die wirkliche Geschwindigkeit $\partial\vec{r}/\partial t$ als eine Überlagerung der Geschwindigkeiten $\pm c$, dh. als "Zitterbewegung" vorstellen muß.

Ergänzt man den DIRAC–HAMILTONoperator (2), d.h. $H_D \;=\; c\,(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}) \;+\; \beta\,m\,c^2 + e\,V$, durch ein Potential V, das wie das Coulombpotential nur vom Radius abhängt, so bleibt die Änderung des Drehimpulses†

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \frac{\hbar\,c}{i}\left(\vec{\alpha}\times\nabla\right)\;. \tag{15}$$

Sie ist daher nicht Null. Mit (12) erhält man für die Änderung von $\vec{\sigma}'$ einen ähnlichen Ausdruck

$$\frac{d\vec{\sigma}'}{dt} = c\left[\,(\vec{\alpha}\cdot\nabla),\,\vec{\sigma}'\right] \;=\; 2\,i\,c\left(\vec{\alpha}\times\nabla\right)\;, \tag{16}$$

dh. die Summe von Bahndrehimpuls $\vec{L}$ und Spin $\frac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma}'$, also der Gesamtdrehimpuls J

$$\vec{J} \;=\; \frac{\hbar}{i}\left(\vec{r}\times\nabla\right) \;+\; \frac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma}' \tag{17}$$

vertauscht mit H_d und ist damit zeitunabhängig.

b) Kontinuitätsgleichung

Die von der nichtrelativistischen Quantenmechanik bekannte Wahrscheinlichkeitsdichte ρ sollte auch für die DIRACgleichung brauchbar sein. Unter Berücksichtigung beider elektromagnetischen Potentiale $\vec{A}$ und V hat H_D die folgende Form an

$$H_d \;=\; c\,\vec{\alpha}\cdot(\vec{p} - e\,\vec{A}/c\,) \;+\; \beta\,m\,c^2 + e\,V\;. \tag{18}$$

Die Dichte ρ ist also festgelegt und für die Stromdichte $\vec{j}$ nimmt man die Geschwindigkeit, wie sie in Gl.(14) definiert ist:

$$\rho = \sum_{k=1}^{4}\chi_k^*\chi_k \quad \text{und} \quad \vec{j} = c\,\sum_{k=1}^{4}\chi_k^*\,\vec{\alpha}_{kl}\,\chi_l\;, \tag{19}$$

† Man zeigt, daß $\frac{d\,\vec{p}}{d\,t} = \frac{1}{i\,\hbar}\left[\,\vec{p},\mathcal{H}_D\right] = -\,e\,\nabla V$ ist. Hängt V nur vom Radius ab, so ist $\nabla V \propto \vec{r}$ und hat kein Drehmoment.

Da die Wellenfunktion χ vier Komponenten hat, muß man sie berücksichtigen. Für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ρ ist es einfach ein Summe. Für $\vec{j}$ tragen mit (14) auch nichtdiagonale Anteile wegen der Matrixstruktur bei, um die Geschwindigkeit an der Stelle $\vec{r}$ und zur Zeit t korrekt zu berechnen. Daß die Kontinuitätsgleichung

$$\partial\rho/\partial t + \operatorname{div}\vec{j} = 0 \tag{20}$$

mit dem Ansatz (19) wirklich gilt, prüft man leicht nach. Da

$$\begin{aligned} \dot{\chi} &= -c\,\vec{\alpha}\cdot\nabla\,\chi + (i\,e/\hbar)\,(\vec{\alpha}\cdot A - V)\,\chi && (21a) \\ \dot{\chi}^* &= -c\,\vec{\alpha}^*\!\cdot\nabla\,\chi^* - (i\,e/\hbar)\,(\vec{\alpha}^*\!\cdot A - V)\,\chi^* \\ &= -c\,\vec{\nabla}\,\chi^*\vec{\alpha} - (i\,e/\hbar)\,(\vec{A}\,\chi^*\vec{\alpha} - V\,\chi^*) && (21b) \end{aligned}$$

bleibt von den Ableitung nach der Zeit nur

$$\dot{\rho} = -c\big((\nabla\,\chi*)\,\vec{\alpha}\,\chi + \chi^*\,\vec{\alpha}\,(\nabla\,\chi)\big)\ , \tag{22}$$

übrig, wobei $\alpha_k^* = \alpha_k^T$ benutzt worden ist ($\alpha_{kl}^T = \alpha_{lk}$ bedeutet die transponiert Matrix). Die Potentialterme mit $\vec{A}$ und V heben sich weg. Damit ist die rechte Seite von (22) gleich $-\operatorname{div}\vec{j}$ mit dem in (19) definierten $\vec{j}$.

c) Lösungen für ebene Wellen

Zum Abschluß noch die Lösungen der Gl.(1), wobei die einfachsten *ebene* Wellen sind! Man sucht eine Lösung mit dem Ansatz

$$\chi(\vec{r},\,t) = \chi_p\,\exp\big(i(\vec{r}\cdot\vec{p} - E_p\,t)/\hbar\big) \tag{23}$$

und erhält mit (1) für das von Ort $\vec{r}$ und Zeit t unabhängige χ_p

$$E_p\,\chi_p = (c\,\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta\,m\,c^2\,)\,\chi_p\ . \tag{24}$$

Für $\vec{p} = 0$ reduziert sich dies zu $E_0\,\chi_0 = m\,c^2\,\beta\,\chi_0$, so daß mit (10$a$) der Eigenwert der Energie $E_0 = \pm m\,c^2$ ist. Die Eigenfunktionen sind $\chi_0 = (\chi_+,\,0)$ für $E_0 = +m\,c^2$ oder $\chi_0 = (0,\,\chi_-)$ für $E_0 = -m\,c^2$. Die Funktionen $\chi_\pm$ können beliebig sein. Sollen sie jedoch noch Eigenfunktionen zu σ_3' von Gl.(11) sein, so ist $\chi_{+\uparrow} = (1,\,0)$ für $\hbar/2$ und $\chi_{+\downarrow} = (0,\,1)$ für $-\hbar/2$ mit (17). Für χ_- gilt dies analog.

Ist $\vec{p} \neq 0$, dann sind die Funktionen χ_+ und χ_- miteinander verknüpft. Mit $\chi_p = (\chi_{p+},\,\chi_{p-})$ und (10a,b) läßt sich (24) folgendermaßen schreiben

$$\begin{aligned} (E_p - m\,c^2)\,\chi_{p+} &= c\,(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\,\chi_{p-} && (25a) \\ (E_p + m\,c^2)\,\chi_{p-} &= c\,(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\,\chi_{p+} && (25b) \end{aligned}$$

Eliminiert man χ_{p-}, dann ist (25a) gleich $(E_p + m\,c^2)(E_p - m\,c^2)\,\chi_{p+} = c^2\,(\sigma\cdot p)^2\,\chi_{p+}$, d.h. die relativistische Energie–Impulsbeziehung $E_p^2 = (c\,\vec{p})^2 + m\,c^2$ muß gelten. Nimmt man wie vorher für $\chi_{p+} = (1,\,0)$, dann ergibt sich mit (25b) für $\chi_{p-} = c\,(p_z,\,p_x + i\,p_y)/(E_p + m\,c^2)$. Man nennt χ_{p-} die *kleine* Komponente, weil für $E_p \approx m\,c^2$ das Verhältnis $|\chi_{p+}/\chi_{p-}| \approx cp/(2\,m\,c^2) \ll 1$ ist.