Vorlesung 23

Freie Lösungen der Dirac-Gleichung

Die Dirac-Gleichung lautet

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = H\Psi = \left(c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + mc^2\beta\right)\Psi, \tag{1}$$

wobei

$$\beta = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix}, \quad \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \tag{2}$$

Der Hamiltonoperator H ist zeitunabhängig und kommutiert mit $\vec{p}$. Das bedeutet, dass wir stationäre Lösungen suchen müssen, die einen bestimmten Impuls haben. D.h.

$$\Psi(t,\vec{r}) = u(\vec{p})e^{-iEt/\hbar + i\vec{p}\vec{r}/\hbar}, \tag{3}$$

wobei

$$u(\vec{p}) = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} \tag{4}$$

ein Spinor ist.

Es folgt aus der Dirac-Gleichung, dass $u(\vec{p})$ folgende Gleichung erfüllen muss

$$Eu = \left(c\,\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + mc^2\beta\right)u. \tag{5}$$

Wir multiplizieren beide Seiten mit der Matrix β und erhalten

$$\left(E\gamma^0 - c\vec{\gamma}\cdot\vec{p} - mc^2\right)u(\vec{p}) = 0. \tag{6}$$

Wir drücken u durch zwei Spinoren mit zwei Komponenten aus,

$$u(\vec{p}) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \tag{7}$$

und erhalten

$$\begin{pmatrix} E - mc^2 & -c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \\ c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} & -E - mc^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = 0. \tag{8}$$

Diese Gleichung hat nicht-triviale Lösungen falls

$$\det\begin{pmatrix} E - mc^2 & -c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \\ c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} & -E - mc^2 \end{pmatrix} = 0. \tag{9}$$

Wir berechnen die Determinante und erhalten

$$-(E^2 - m^2c^4) + c^2\vec{p}^2 = 0 \;\Rightarrow\; E^2 = c^2\vec{p}^2 + m^2c^4, \quad E = \pm\sqrt{\vec{p}^2c^2 + m^2c^4}. \tag{10}$$

Wir sehen, dass wir auch in diesem Fall zwei Lösungen haben, einmal mit positiver Energie und einmal mit negativer.

Wir wollen jetzt diese zwei Lösungen konstruieren. Wir fangen mit dem Fall der positiven Energie an. Wir erhalten die Beziehung zwischen den zwei Spinoren

$$c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\varphi - (E+mc^2)\chi = 0 \quad\Rightarrow\quad \chi = \frac{c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E+mc^2}\varphi \tag{11}$$

und erhalten

$$u(\vec{p},s) = N\begin{pmatrix} \varphi_s \\ \frac{c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E+mc^2}\varphi_s \end{pmatrix}, \qquad E = \sqrt{c^2\vec{p}^2 + m^2c^4}. \tag{12}$$

Das zweite Argument $s = \pm 1$ verdeutlicht, dass es zwei unabhängige Spinoren φ gibt.

Im Falle negativer Energie bezeichnen wir den u-Spinor als v. In dem Fall sieht die Relation zwischen φ und χ so aus

$$(E-mc^2)\varphi - c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\chi = 0, \quad\Rightarrow\quad \varphi = -\frac{c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E-mc^2}\chi. \tag{13}$$

Das Ergebnis für den Spinor lautet

$$v(\vec{p},s) = N\begin{pmatrix} -\frac{c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E-mc^2}\chi_s \\ \chi_s \end{pmatrix}, \qquad E = -\sqrt{c^2\vec{p}^2 + m^2c^4}. \tag{14}$$

Wir haben die Lösungen der Dirac-Gleichung so konstruiert, dass der nicht-relativistische Limes regulär ist. In der Tat ist es einfach, den Limes $p/mc \ll 1$ zu berechnen und wir erhalten

$$\lim_{|\vec{p}|\ll mc} u(\vec{p},s) = N\begin{pmatrix} \varphi_s \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \lim_{|\vec{p}|\ll mc} v(\vec{p},s) = N\begin{pmatrix} 0 \\ \chi_s \end{pmatrix}, \tag{15}$$

Um physikalische Größen berechnen zu können, muss die Wellenfunktion normiert sein. Für

$$\Psi_{\vec{p},s}(t,\vec{r}) = u(\vec{p},s)e^{-iEt/\hbar + i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}, \tag{16}$$

lautet die Normierungsbedingung

$$\int \mathrm{d}^3\vec{r}\,\Psi^\dagger_{\vec{p}',s'}(t,r)\Psi_{\vec{p},s}(t,r) = (2\pi\hbar)^3\delta(\vec{p}-\vec{p}')\delta_{ss'}. \tag{17}$$

Das bedeutet, dass die Spinoren die folgende Gleichung erfüllen müssen

$$u^\dagger(\vec{p},s)u(\vec{p},s') = \delta_{ss'}. \tag{18}$$

Wir benutzen Gl. (12) und erhalten

$$u^\dagger(\vec{p},s)u(\vec{p},s') = N^2\varphi_s^\dagger\varphi_s'\left(1 + \frac{c^2\vec{p}^2}{(E+mc^2)^2}\right) = N^2\varphi_s^\dagger\varphi_s'\frac{2E}{(E+mc^2)} = \delta_{ss'}. \tag{19}$$

Wir berechnen den Normierungsfaktor

$$N = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2E}} \tag{20}$$

und erhalten

$$\Psi_{E>0,\vec{p},s}(t,\vec{r}) = u(\vec{p},s)e^{-iEt/\hbar + i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}, \quad u(\vec{p},s) = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2E}} \begin{pmatrix} \varphi_s \\ \frac{c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E+mc^2}\,\varphi_s \end{pmatrix}. \tag{21}$$

Wir wollen $\Psi(\vec{r},t)$ als die Wellenfunktion des Elektrons interpretieren und, in Prinzip, alles Mögliche mit dieser Wellenfunktion berechnen. Als Beispiel betrachten wir den Geschwindigkeitsoperator $\vec{v} = \mathrm{d}\vec{r}/\mathrm{d}t$. Diesen Operator erhalten wir aus

$$\vec{v} = \frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\,[\vec{r}, H] = \frac{c}{i\hbar}\,[\vec{r}, \vec{\alpha}\cdot\vec{p}] = c\vec{\alpha}. \tag{22}$$

Dieser Operator kommutiert nicht mit dem Hamiltonoperator

$$[\vec{v}, H] \neq 0. \tag{23}$$

Deswegen können wir nur den Erwartungswert des Geschwindigkeitsoperators berechnen. Dann

$$\langle \vec{v}_i \rangle = u^\dagger(\vec{p},s)c\vec{\alpha}_i\; u(\vec{p},s) = \frac{N^2c^2}{E + mc^2}\,\varphi_s^\dagger\,(\sigma_i\vec{\sigma}\cdot\vec{p} + \vec{\sigma}\cdot\vec{p}\sigma_i)\,\varphi_s = \frac{p_i c^2}{E}. \tag{24}$$

Diese Relation zwischen $\vec{p}, E$ und der Geschwindigkeit ist genau das, was man für ein relativistisches Teilchen erwartet.

Ein anderer wichtiger Operator ist der Gesamtdrehimpulsoperator $\vec{J}$. Dieser Operator muss, im freien Fall, mit dem Hamiltonoperator kommutieren. Wir wissen, dass der Gesamtdrehimpuls durch eine Summe von Bahndrehimpuls und Spin gegeben ist,

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \tag{25}$$

Unser Ziel ist, den Spinoperator im relativistischen Fall zu bestimmen.

Wir fangen mit dem Bahndrehimpuls $\vec{L} = [\vec{r}\times\vec{p}]$ an und berechnen dessen Kommutator mit dem Hamiltonoperator

$$[L, H] = [L, c\vec{\alpha}\cdot\vec{p}] = ic\hbar[\vec{\alpha}\times\vec{p}]. \tag{26}$$

Wir sehen, dass der Bahndrehimpuls nicht allein erhalten ist. Falls wir allerdings den Kommutator zwischen H und

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \tag{27}$$

berechnen, bekommen wir

$$[\vec{\Sigma}, H] = 2ci[\vec{p}\times\vec{\alpha}]. \tag{28}$$

Es ist offensichtlich, dass

$$[\vec{L} + \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}, H] = 0, \tag{29}$$

sodass der Gesamtdrehimpulsoperator durch

$$\vec{J} = \vec{L} + \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}, \tag{30}$$

gegeben ist und der Spinoperator durch

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}. \tag{31}$$

Eine interessante Folge von Gl. (28) ist, dass der Operator $\vec{p} \cdot \vec{\Sigma}$ erhalten ist

$$\left[\vec{p} \cdot \vec{\Sigma}, H\right] = 0. \tag{32}$$

Dieser Operator entspricht der Projektion des Spins auf den Impuls des Teilchens.

Wir gehen zurück zu den Lösungen der Dirac-Gleichung und betrachten die Zustände mit negativer Energie. Diese Lösungen schreiben wir als

$$\Psi_{E<0,\vec{p},s}(t,\vec{r}) = v(\vec{p},s)e^{+iE_pt/\hbar + i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}, \quad v(\vec{p},s) = \sqrt{\frac{E_p + mc^2}{2E_p}} \begin{pmatrix} \frac{c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E_p+mc^2}\chi_s \\ \chi_s \end{pmatrix}, \tag{33}$$

wobei $E_p = \sqrt{c^2\vec{p}^2 + m^2c^4}$. Wir können die vier unabhängigen Lösungen der Dirac-Gleichung ($\Psi_{E>0,\vec{p},s=\pm}$, $\Psi_{E<0,\vec{p},s=\pm}$) als Basis nutzen. Alle möglichen Lösungen der Dirac-Gleichung können dann als Linearkombinationen dieser vier Lösungen dargestellt werden.

Wir wollen jetzt diskutieren, was die Lösungen mit negativen Energien eigentlich bedeuten. Um das zu erklären, betrachten wir noch einmal die Dirac-Gleichung im externen elektromagnetischen Feld

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \left(\beta mc^2 + \vec{\alpha}\left(c\vec{p} - e\vec{A}\right) + eA_0\right)\Psi. \tag{34}$$

Wir wollen zeigen, dass wir, falls wir eine Lösung $\Psi(t,\vec{r})$ kennen, eine andere Lösung mit interessanten Eigenschaften konstruieren können.

Als ersten Schritt berechnen wir die komplex-konjugierte Gleichung. Wir erhalten

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^* = \left(-\beta mc^2 + \vec{\alpha}^*\left(c\vec{p} + e\vec{A}\right) - eA_0\right)\Psi^*. \tag{35}$$

Jetzt multiplizieren wir diese Gleichung mit einer Matrix C, sodass

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[C\Psi^*\right] = \left(-C\beta C^{-1}mc^2 + C\vec{\alpha}^*C^{-1}\cdot\left(c\vec{p} + e\vec{A}\right) - eA_0\right)\left[C\Psi^*\right]. \tag{36}$$

Wir wollen dabei die Matrix C so wählen, dass

$$C\beta C^{-1} = -\beta, \quad C\vec{\alpha}^*C^{-1} = \vec{\alpha}. \tag{37}$$

Falls wir so eine Matrix finden, erhalten wir aus Gl. (36)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[C\Psi^*\right] = \Big(\beta mc^2 + \vec{\alpha}\cdot\,\Big(c\vec{p} + e\vec{A}\Big) - eA_0\Big)\,\left[C\Psi^*\right]. \tag{38}$$

Wir vergleichen diese Gleichung mit der Gl. (34) und erkennen, dass $\Psi' = C\Psi^*$ ein Dirac-Teilchen beschreibt und zwar eines mit Ladung $e' = -e$ sowie der gleichen Masse. D.h., wir sagen vorher, dass ein Spin-1/2 Teilchen mit der Masse des Elektrons und positiver Ladung existieren soll. Dieses Teilchen heißt "Positron"; es wurde 1932 von Carl Anderson entdeckt – vier Jahre nach der Vorhersage von Dirac.

Es ist einfach nachzurechnen, dass die hermitesche Matrix

$$C = i\beta\alpha_y, \quad C^\dagger = C, \quad C^\dagger C = 1, \tag{39}$$

die Bedingungen in Gl. (37) erfüllt.

Wir können jetzt die Lösung der Dirac-Gleichung mit positiver Energie nehmen (siehe Gl. (21)) und die Ladungskonjugation anwenden. Wir bekommen

$$C\Psi^*_{E>0} = e^{iE_pt/\hbar - i\vec{p}\vec{r}/\hbar}\begin{pmatrix} -\frac{(\vec{\sigma}\cdot(-\vec{p}))}{E_p+mc^2}(-i\sigma_y)\varphi_s^* \\ -i\sigma_y\varphi_s^* \end{pmatrix}. \tag{40}$$

Falls wir $-i\sigma_y\phi_s$ als $\chi_{s'}$ bezeichnen, folgt aus Gl. (40)

$$C\Psi^*_{E>0,\vec{p},s} = \Psi_{E<0,-\vec{p},s'}. \tag{41}$$

D.h., dass wir die Lösungen mit negativen Energien als Positronen interpretieren können.

Wir müssen nun etwas zu den Lösungen mit negativen Energien sagen, da wir sonst das gleiche Problem wie im Fall der Klein-Gordon-Gleichung erhalten: Wenn es externe Umstände gibt (z.B. eine Wechselwirkung mit dem elektromagnetischem Feld), kann ein Teilchen mit positiver Energie ein Photon abstrahlen und in ein Zustand mit negativer Energie übergehen. Dass bedeutet, dass die Dirac-Gleichung vorhersagt, dass Elektronen nicht stabil sind, was nicht mit der Beobachtung übereinstimmt.

Dirac hat einen Mechanismus vorgeschlagen, der erklärt, warum diese Instabilität nicht stattfindet. Das Argument ist einfach: Wir sollen uns einfach vorstellen, dass im Grundzustand des Systems alle Zustände mit negativer Energie voll besetzt sind. Weil Elektronen Fermionen sind, ist es dann unmöglich für ein Elektron mit positiver Energie, dank des Pauli-Prinzips, in diese besetzten Zustände überzugehen.

Man kann, mit der entsprechenden Energie $E > 2mc^2$, ein Elektron aus einem Zustand mit der negativer Energie in einen Zustand mit positiver Energie anregen. Dann ergibt sich ein Elektron mit positiver Energie sowie ein Loch. Das Loch kann man dann als ein Positron interpretieren.