Grundzüge der relativistischen Quantenmechanik[1]

1 Von der Schrödinger-Gleichung zur Klein-Gordon-Gleichung

Die **Schrödinger-Gleichung**

$$E\,\psi\left(\vec{r},t\right)=\left(\frac{\vec{p}^{\,2}}{2\cdot m}+V\left(\vec{r},t\right)\right)\psi\left(\vec{r},t\right)=H\,\psi\left(\vec{r},t\right)\text{ mit }E=\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial t}\text{ und }\vec{p}=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla \tag{D1}$$

besitzt neben ihren Vorzügen folgende Mängel:

- Die Schrödinger-Gleichung ist nicht Lorentz-invariant, da die Ableitungen nach der Zeit und dem Ort nicht die gleiche Ordnung haben.
- Die Schrödinger-Gleichung erfüllt nicht die relativistische Energie-Impuls-Beziehung $\frac{E^2}{c^2}=\vec{p}^{\,2}+m^2\cdot c^2$, d. h., sie ist nur dann verwendbar, wenn die Geschwindigkeit des Mikroobjekts wesentlich kleiner als die Lichtgeschwindigkeit ist.

Um dem zweiten Mangel abzuhelfen, wird das **Korrespondenzprinzip**

$$\begin{aligned} E=\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial t} &\quad\leftrightarrow\quad E,\\ \vec{p}=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla &\quad\leftrightarrow\quad \vec{p}\end{aligned} \tag{D2}$$

auf die relativistische Energie-Impuls-Beziehung angewendet:

$$\frac{E^2}{c^2}=\vec{p}^{\,2}+m^2\cdot c^2 \qquad \Big|\, E\rightarrow E=\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial t};\ \vec{p}\rightarrow\vec{p}=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla,$$

$$\mathrm{i}^2\cdot\hbar^2\cdot\frac{\partial^2}{\partial(c\cdot t)^2}\psi\left(\vec{r},t\right)=\left(\frac{\hbar^2}{\mathrm{i}^2}\nabla^2+m^2\cdot c^2\right)\psi\left(\vec{r},t\right),$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial(c\cdot t)^2}-\Delta+\frac{m^2\cdot c^2}{\hbar^2}\right)\psi\left(\vec{r},t\right)=0\ \ldots\ \textbf{Klein-Gordon-Gleichung}. \tag{D3}$$

Die Klein-Gordon-Gleichung ist Lorentz-invariant und erfüllt die relativistische Energie-Impuls-Beziehung. Diese Gleichung ist für die Beschreibung von Bosonen (Mikroobjekte mit Spin null) geeignet, z. B. Pionen, Kaonen. Allerdings erfüllt sie die Kontinuitätsgleichung nicht so, dass sich deren skalare Größe als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretieren lässt. Außerdem beschreibt sie die Bindungszustände des Elektrons im Wasserstoffatom nicht korrekt (lediglich die Bindungsenergie -13,6 eV des Grundzustands wird richtig modelliert), da sie den Spin des Elektrons nicht erfasst.

Die genannten Mängel veranlassten Dirac, nach einer Gleichung zu suchen, die Fermionen besser modelliert.

---

[1] Die Ausführungen orientieren sich an folgenden Quellen:
Abschn. 1 bis 2.2: Gros, C.: Uni Frankfurt. Vorlesungsskript Quantenmechanik 2. https://itp.uni-frankfurt.de/~gros; all.pdf (2022). Zugegriffen: 03.04.25.
Abschn. 2.3: Rischke, D.: Uni Frankfurt. Vorlesungsskript Theoretische Physik VI. Skript_QMII_SoSe2016.pdf (2016). Zugegriffen: 03.04.25.
Soff, G.†: Uni Dresden. Vorlesungsskript Quantenfeldtheorie. FB10 - Quantenfeldtheorie (2002). Zugegriffen: 03.04.25.

2 Elemente der Dirac-Theorie

2.1 Dirac-Gleichung für ein freies Mikroobjekt

Zunächst wird eine Gleichung für ein freies Mikroobjekt gesucht, d. h., es wird der Fall betrachtet, dass keine äußeren Felder auf das Mikroobjekt einwirken.

Die gesuchte Dirac-Gleichung soll folgende Eigenschaften besitzen:

- Die Dirac-Gleichung soll Lorentz-invariant sein. Deshalb müssen die Ableitungen nach der Zeit und dem Ort die gleiche Ordnung haben (gewählt wird die Ordnung eins).
- Die Dirac-Gleichung soll die relativistische Energie-Impuls-Beziehung $E^2 = c^2 \cdot \vec{p}^{\,2} + m^2 \cdot c^4$ erfüllen.
- Die Dirac-Gleichung soll von ebenen Wellen $\psi(\vec{r}, t) = A \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}\cdot(\vec{p}\bullet\vec{r} - E\cdot t/\hbar)}$ gelöst werden.
- Die Dirac-Gleichung soll die Kontinuitätsgleichung so erfüllen, dass sich deren skalare Größe als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretieren lässt.
- Die Dirac-Gleichung soll die beiden experimentell gemessenen Spinzustände für Elektronen beschreiben.

Für die **Dirac-Gleichung** wird folgender Ansatz gewählt:

$$\mathrm{E}\,\psi(\vec{r}, t) = \mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\frac{\partial\psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(c\cdot\vec{\alpha}\bullet\vec{p} + \beta\cdot m\cdot c^2\right)\psi(\vec{r}, t) = H_{\text{Dirac}}\,\psi(\vec{r}, t) \tag{D4}$$

… **Dirac-Gleichung für ein freies Mikroobjekt (Formulierung als Operatorgleichung)**.

Die Gleichung (D4) wird etwas salopp auch als **„freie Dirac-Gleichung“** bezeichnet.

Die Variablen haben folgende Bedeutung:

$\mathrm{E} = \mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\dfrac{\partial}{\partial t}$	Energieoperator,
i	imaginäre Einheit,
$\hbar$	reduziertes Wirkungsquantum,
ψ	Wellenfunktion, Zustandsfunktion,
$\vec{r}$	Ortsvektor,
t	Zeit,
c	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum,
$\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$	Vektor von Matrizen, deren Elemente imaginäre Zahlen sind,
$\vec{p} = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} = \dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\begin{pmatrix} \partial_1 \\ \partial_2 \\ \partial_3 \end{pmatrix} = \dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\begin{pmatrix} \nabla_1 \\ \nabla_2 \\ \nabla_3 \end{pmatrix}$	Impulsoperator,
β	Matrix, deren Elemente reelle Zahlen sind,
m	Ruhemasse des Mikroobjekts,
H_{Dirac}	Dirac-Operator.

Schritt 1: Bestimmung der Matrizen α_i und β

Zunächst wird aus der Operatorgleichung (D4) mit einem **Trick** eine Größengleichung erarbeitet. Da Ableitungen nach der Zeit und dem Ort nach dem Satz von Schwarz vertauscht werden dürfen, kommutieren die Operatoren E und $\vec{p}$ sowie E und H_{Dirac}, d. h., es gilt $\left[\mathrm{E}, \vec{p}\right] = \left[\mathrm{E}, H_{\text{Dirac}}\right] = 0$. Deshalb besitzen diese Operatoren ein gemeinsames System von Eigenzuständen (ein vollständiges Orthonormalsystem, d. h. ein VONS). In diesem VONS gelten folgende Eigenwertgleichungen:

$$\mathrm{E}\,\psi = E\cdot\psi\,, \tag{D5}$$

$$\left(c\cdot\vec{\alpha}\bullet\vec{p}+\beta\cdot m\cdot c^2\right)\psi = \left(c\cdot\vec{\alpha}\bullet\vec{p}+\beta\cdot m\cdot c^2\right)\psi\,. \tag{D6}$$

Einsetzen von (D5) und (D6) in (D4) ergibt eine Größengleichung, die für Berechnungen nützlich ist:

$$E\cdot\psi = \left(c\cdot\vec{\alpha}\bullet\vec{p}+\beta\cdot m\cdot c^2\right)\psi \tag{D7}$$

… **Dirac-Gleichung für ein freies Mikroobjekt (Formulierung als Größengleichung)**.

Fazit: Das Korrespondenzprinzip (D2) gilt in beiden Richtungen!

Um die Matrizen α_i und β bestimmen zu können, wird (D7) formal umgeformt:

$$\begin{aligned}
0 &= \left(c\cdot\vec{\alpha}\bullet\vec{p}+\beta\cdot m\cdot c^2-E\right)\psi = \left(H_{\text{Dirac}}-E\right)\psi && \Big|\left(H_{\text{Dirac}}+E\right)\cdot\,,\\
0 &= \left(H_{\text{Dirac}}^2-H_{\text{Dirac}}\cdot E+E\cdot H_{\text{Dirac}}-E^2\right)\psi && \Big|\,H_{\text{Dirac}}\cdot E = E\cdot H_{\text{Dirac}}\,,\\
0 &= \left(H_{\text{Dirac}}^2-E^2\right)\psi.
\end{aligned}$$

Die letztgenannte Beziehung soll für alle Lösungen ψ gelten, deshalb ergibt sich

$$H_{\text{Dirac}}^2 = \left(c\cdot\vec{\alpha}\bullet\vec{p}+\beta\cdot m\cdot c^2\right)^2 = E^2 \stackrel{!}{=} c^2\cdot\vec{p}^{\,2}+m^2\cdot c^4\,.$$

Die letztgenannte Gleichung wird in **Anhang 1** umgeformt zu

$$c^2\cdot\vec{p}^{\,2}+m^2\cdot c^4 = \frac{c^2}{2}\cdot\sum_{i,\,j=1}^{3}\left(\alpha_i\bullet\alpha_j+\alpha_j\bullet\alpha_i\right)\cdot p_i\cdot p_j + m\cdot c^3\cdot\sum_{i=1}^{3}\left(\alpha_i\bullet\beta+\beta\bullet\alpha_i\right)\cdot p_i + m^2\cdot c^4\cdot\beta^2\,.$$

Durch Koeffizientenvergleich ergeben sich folgende **Beziehungen für die Matrizen** α_i und β:

$$\left\{\alpha_i,\alpha_j\right\} = \alpha_i\bullet\alpha_j+\alpha_j\bullet\alpha_i = 2\cdot\delta_{ij}\cdot\mathbb{1}_N\,,\ \text{d. h.}\ \alpha_i\bullet\alpha_i = \mathbb{1}_N\ \text{und}\ \alpha_i = \alpha_i^{-1}\,, \tag{D8}$$

$$\left\{\alpha_i,\beta\right\} = \alpha_i\bullet\beta+\beta\bullet\alpha_i = \mathbb{0}_N\,, \tag{D9}$$

$$\beta^2 = \mathbb{1}_N\,,\ \text{d. h.}\ \beta = \beta^{-1}. \tag{D10}$$

Dabei sind $\mathbb{1}_N$ bzw. $\mathbb{0}_N$ die *N*-dimensionale Einheitsmatrix bzw. Nullmatrix.

Aus diesen Beziehungen lassen sich **weitere Eigenschaften** der $N\times N$-Matrizen α_i und β folgern:

- Aus (D9) ergibt sich:
  $$\beta\bullet\alpha_i = -\alpha_i\bullet\beta = \left(-\mathbb{1}_N\right)\bullet\alpha_i\bullet\beta \qquad \Big|\,\det\,,$$
  $$\det\beta\cdot\det\alpha_i = (-1)^N\cdot\det\alpha_i\cdot\det\beta\,.$$
  Die Matrizen α_i und β sind regulär, denn sie besitzen jeweils eine Inverse, die nach (D8) und (D10) mit der jeweiligen Matrix übereinstimmt. Deshalb sind die Determinanten dieser Matrizen ungleich null und es folgt:
  $1 = (-1)^N$ … Die **Dimension** *N* der Matrizen ist gerade.

- Für die Spur der Matrizen gilt mit (D8) bis (D10) sowie der Vertauschbarkeit von Faktoren bei der Spurbildung:

$$\left.\begin{aligned}\mathrm{Sp}\left(\alpha_i\bullet\beta\bullet\alpha_i\right)&=\mathrm{Sp}\big(\underbrace{\alpha_i\bullet\alpha_i}_{1_N}\bullet\beta\big)=\mathrm{Sp}\left(\beta\right)\\ \mathrm{Sp}\left(\alpha_i\bullet\beta\bullet\alpha_i\right)&=\mathrm{Sp}\left(\alpha_i\bullet\left(-\alpha_i\bullet\beta\right)\right)=-\mathrm{Sp}\big(\underbrace{\alpha_i\bullet\alpha_i}_{1_N}\bullet\beta\big)=-\mathrm{Sp}\left(\beta\right)\end{aligned}\right\}\Rightarrow\mathrm{Sp}\left(\beta\right)=0\,,$$

$$\left.\begin{aligned}\mathrm{Sp}\left(\beta\bullet\alpha_i\bullet\beta\right)&=\mathrm{Sp}\big(\underbrace{\beta\bullet\beta}_{1_N}\bullet\alpha_i\big)=\mathrm{Sp}\left(\alpha_i\right)\\ \mathrm{Sp}\left(\beta\bullet\alpha_i\bullet\beta\right)&=\mathrm{Sp}\left(\beta\bullet\left(-\beta\bullet\alpha_i\right)\right)=-\mathrm{Sp}\big(\underbrace{\beta\bullet\beta}_{1_N}\bullet\alpha_i\big)=-\mathrm{Sp}\left(\alpha_i\right)\end{aligned}\right\}\Rightarrow\mathrm{Sp}\left(\alpha_i\right)=0\,.$$

  … Die **Spur** der Matrizen ist jeweils null.

Die Bedingungen (D8) bis (D10) und die beiden weiteren Eigenschaften legen die Matrizen α_i und β noch nicht eindeutig fest. Verbleibende Freiheiten werden genutzt, um **weitere Vorgaben für die Matrix** β zu formulieren:

Die Matrix β soll eine Diagonalmatrix mit reellen Eigenwerten sein.

Damit ergibt sich aus der Eigenwertgleichung dieser Matrix:

$$\beta\bullet\vec{v}=\lambda\cdot\vec{v}\qquad\Big|\,\beta\bullet\,,$$

$$\underbrace{\beta\bullet\beta}_{1}\bullet\vec{v}=\lambda\cdot\underbrace{\beta\bullet\vec{v}}_{\lambda\cdot\vec{v}}\,,$$

$$\vec{v}=\lambda^2\cdot\vec{v}\,,$$

$$\lambda^2=1\qquad\Big|\,\lambda\text{ reell}\,,$$

$$\lambda_i=\pm1.$$

Wegen der Spurfreiheit der Matrix β müssen die Eigenwerte $+1$ und -1 in gleicher Anzahl in der Hauptdiagonalen stehen. Es wird festgelegt, dass alle Eigenwerte $+1$ oben und alle Eigenwerte -1 unten stehen. Deshalb besitzt die Matrix β folgende Form:

$$\beta=\left(\begin{array}{ccc|ccc}1&0&\cdots&&&\\0&\ddots&&&\mathbb{O}&\\\vdots&&1&&&\\\hline&&&-1&0&\cdots\\&\mathbb{O}&&0&\ddots&\\&&&\vdots&&-1\end{array}\right)=\begin{pmatrix}1_{N/2}&\mathbb{O}_{N/2}\\\mathbb{O}_{N/2}&-1_{N/2}\end{pmatrix}.$$

Da die Dimension der Matrix β gerade ist, wird zunächst geprüft, ob es sich um eine 2x2-Matrix handeln kann. In **Anhang 2** wird gezeigt, dass dies nicht möglich ist, da sich in diesem Fall für β die Nullmatrix ergeben würde. Zielführend ist folgender Ansatz einer 4x4-Matrix:

$$\beta=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1_2&\mathbb{O}_2\\\mathbb{O}_2&-1_2\end{pmatrix}.\tag{D11}$$

Für die Matrizen α_i wird mit den **Pauli-Matrizen** σ_i experimentiert. In **Anhang 3** wird nachgewiesen, dass folgende Matrizen alle Bedingungen erfüllen:

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} = \sigma_1 \bullet \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} \text{ mit } \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{D12}$$

$$\alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & 0 & \mathrm{i} & 0 \\ 0 & -\mathrm{i} & 0 & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} = \sigma_2 \bullet \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} \text{ mit } \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \tag{D13}$$

$$\alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} = \sigma_3 \bullet \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} \text{ mit } \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{D14}$$

Formal gilt für den **Vektor der α_i-Matrizen**:

$$\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \left(\sigma_1 \bullet \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix}, \sigma_2 \bullet \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix}, \sigma_3 \bullet \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} \right), \tag{D15}$$

$$\vec{\alpha} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \bullet \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} =: \vec{\sigma} \bullet \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix}. \tag{D16}$$

In der letztgenannten Gleichung wurde der **Vektor der Pauli-Matrizen** $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ definiert.

Für die Wellenfunktion gilt

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \dots \textbf{ Wellenfunktion, Dirac-Spinor}. \tag{D17}$$

Die Bezeichnung **Spinor** weist darauf hin, dass sich dieses Objekt bei einer Drehung um $2 \cdot \pi$ in sein Entgegengesetztes transformiert, während ein Vektor bei dieser Operation in sich selbst übergeht.

Durch Anschauen bzw. Nachrechnen werden folgende **Beziehungen** bestätigt:

$$\alpha_i^\dagger = \alpha_i \text{ und } \sigma_i^\dagger = \sigma_i \text{ und } \beta^\dagger = \beta, \tag{D18}$$

$$\sigma_i \bullet \sigma_j = \mathrm{i} \cdot \varepsilon^{ijk} \cdot \sigma_k + \delta_{ij} \cdot \mathbb{1}_2, \tag{D19}$$

$$[\sigma_i, \sigma_j] = \sigma_i \bullet \sigma_j - \sigma_j \bullet \sigma_i = \left(\mathrm{i} \cdot \varepsilon^{ijk} \cdot \sigma_k + \delta_{ij} \cdot \mathbb{1}_2\right) - \left(\mathrm{i} \cdot \varepsilon^{jik} \cdot \sigma_k + \delta_{ji} \cdot \mathbb{1}_2\right) \quad \Big| \, \varepsilon^{jik} = -\varepsilon^{ijk}, \delta_{ji} = \delta_{ij},$$

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2 \cdot \mathrm{i} \cdot \varepsilon^{ijk} \cdot \sigma_k. \tag{D20}$$

Das **Epsilon-Symbol** ist folgendermaßen definiert:

$$\varepsilon^{123} = \varepsilon^{231} = \varepsilon^{312} = 1, \varepsilon^{132} = \varepsilon^{213} = \varepsilon^{321} = -1, \varepsilon^{ijk} = 0 \text{ sonst}. \tag{D21}$$

Beispielsweise gelten:

$$\left.\begin{aligned} \sigma_1 \bullet \sigma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{i} & 0 \\ 0 & -\mathrm{i} \end{pmatrix} = \mathrm{i} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \mathrm{i} \cdot \sigma_3 \\ \sigma_2 \bullet \sigma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathrm{i} & 0 \\ 0 & \mathrm{i} \end{pmatrix} = -\mathrm{i} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -\mathrm{i} \cdot \sigma_3 \end{aligned} \right\} \Rightarrow [\sigma_1, \sigma_2] = 2 \cdot \mathrm{i} \cdot \sigma_3 = 2 \cdot \mathrm{i} \cdot \varepsilon^{123} \cdot \sigma_3.$$

Zwischenstand:

Die Dirac-Gleichung besitzt folgende Eigenschaften:

- Sie erfüllt die relativistische Energie-Impuls-Beziehung $E^2 = c^2 \cdot \vec{p}^2 + m^2 \cdot c^4$.
- Sie wird von ebenen Wellen $\psi(\vec{r}, t) = A \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}\cdot(\vec{p}\bullet\vec{r} - E\cdot t/\hbar)}$ gelöst.
- Es kann gezeigt werden, dass sie die Kontinuitätsgleichung so erfüllt, dass sich deren skalare Größe als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretieren lässt.

Noch zu betrachten:

- Die Dirac-Gleichung soll die beiden experimentell gemessenen Spinzustände für Elektronen beschreiben.
- Die Dirac-Gleichung soll Lorentz-invariant sein.

Schritt 2: Lösung der Dirac-Gleichung für freie Mikroobjekte

Die Wellenfunktion der Dirac-Gleichung besitzt vier Komponenten. Da sie eine ebene Welle darstellt, hat die Amplitude dieser Welle ebenfalls vier Komponenten, die unabhängig von $\vec{r}$ und t sein sollen. Die Komponenten der Amplitude dieser Welle dürfen von $\vec{p}$ bzw. wegen $\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}$ von $\vec{k}$ abhängen (um Verwechslungen mit dem Impulsoperator $\vec{p}$ auszuschließen, wird $\vec{k}$ benutzt). Es wird sich als günstig erweisen, die Amplitude der Wellenfunktion in Komponentenpaare aufzuteilen:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1(\vec{k}) \\ A_2(\vec{k}) \\ A_3(\vec{k}) \\ A_4(\vec{k}) \end{pmatrix} \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}\cdot(\vec{p}\bullet\vec{r} - E\cdot t/\hbar)} =: \begin{pmatrix} a(\vec{k}) \\ b(\vec{k}) \end{pmatrix} \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}\cdot(\vec{p}\bullet\vec{r} - E\cdot t/\hbar)} \tag{D22}$$

mit $a(\vec{k}) = \begin{pmatrix} a_1(\vec{k}) \\ a_2(\vec{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1(\vec{k}) \\ A_2(\vec{k}) \end{pmatrix}$ und $b(\vec{k}) = \begin{pmatrix} b_1(\vec{k}) \\ b_2(\vec{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_3(\vec{k}) \\ A_4(\vec{k}) \end{pmatrix}$.

Einsetzen in (D7) ergibt unter Berücksichtigung von (D11) und (D16), d. h. $\beta = \begin{pmatrix} 1_2 & 0_2 \\ 0_2 & -1_2 \end{pmatrix}$, $\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0_2 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0_2 \end{pmatrix}$:

$$E \cdot \psi = \left(c \cdot \vec{\alpha} \bullet \vec{p} + \beta \cdot m \cdot c^2\right)\psi \qquad \Big| \, \vec{p} = \hbar \cdot \vec{k},$$

$$E \cdot \begin{pmatrix} a(\vec{k}) \\ b(\vec{k}) \end{pmatrix} \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}\cdot(\vec{p}\bullet\vec{r} - E\cdot t/\hbar)} = \left(c \cdot \hbar \cdot \vec{\alpha} \bullet \vec{k} + \beta \cdot m \cdot c^2\right) \bullet \begin{pmatrix} a(\vec{k}) \\ b(\vec{k}) \end{pmatrix} \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}\cdot(\vec{p}\bullet\vec{r} - E\cdot t/\hbar)} \qquad \Big| : \mathrm{e}^{\mathrm{i}\cdot(\vec{p}\bullet\vec{r} - E\cdot t/\hbar)} \neq 0,$$

$$E \cdot \begin{pmatrix} a(\vec{k}) \\ b(\vec{k}) \end{pmatrix} = \left(c \cdot \hbar \cdot \begin{pmatrix} 0_2 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0_2 \end{pmatrix} \bullet \vec{k} + \begin{pmatrix} 1_2 & 0_2 \\ 0_2 & -1_2 \end{pmatrix} \cdot m \cdot c^2\right) \bullet \begin{pmatrix} a(\vec{k}) \\ b(\vec{k}) \end{pmatrix},$$

$$E \cdot \begin{pmatrix} a(\vec{k}) \\ b(\vec{k}) \end{pmatrix} = c \cdot \hbar \cdot \begin{pmatrix} 0_2 & \vec{\sigma}\bullet\vec{k} \\ \vec{\sigma}\bullet\vec{k} & 0_2 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} a(\vec{k}) \\ b(\vec{k}) \end{pmatrix} + m \cdot c^2 \cdot \begin{pmatrix} 1_2 & 0_2 \\ 0_2 & -1_2 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} a(\vec{k}) \\ b(\vec{k}) \end{pmatrix},$$

$$E \cdot \begin{pmatrix} a(\vec{k}) \\ b(\vec{k}) \end{pmatrix} = c \cdot \hbar \cdot \begin{pmatrix} \vec{\sigma}\bullet\vec{k} \cdot b(\vec{k}) \\ \vec{\sigma}\bullet\vec{k} \cdot a(\vec{k}) \end{pmatrix} + m \cdot c^2 \cdot \begin{pmatrix} a(\vec{k}) \\ -b(\vec{k}) \end{pmatrix},$$

$$\left.\begin{array}{lcl} E \cdot a(\vec{k}) & = & c \cdot \hbar \cdot \vec{\sigma}\bullet\vec{k} \cdot b(\vec{k}) + m \cdot c^2 \cdot a(\vec{k}) \\ \underline{E \cdot b(\vec{k})} & \underline{=} & \underline{c \cdot \hbar \cdot \vec{\sigma}\bullet\vec{k} \cdot a(\vec{k}) - m \cdot c^2 \cdot b(\vec{k})} \end{array}\right| . \tag{D23}$$

Die zweite Gleichung des Gleichungssystems wird nach $b(\vec{k})$ aufgelöst, das ergibt

$$b(\vec{k}) = \frac{c \cdot \hbar \cdot \vec{\sigma} \bullet \vec{k}}{E + m \cdot c^2} \cdot a(\vec{k}) . \tag{D24}$$

Dieses Ergebnis wird in die erste Gleichung eingesetzt:

$$E \cdot a(\vec{k}) = c \cdot \hbar \cdot \vec{\sigma} \bullet \vec{k} \cdot \frac{c \cdot \hbar \cdot \vec{\sigma} \bullet \vec{k} \cdot a(\vec{k})}{E + m \cdot c^2} + m \cdot c^2 \cdot a(\vec{k}) \qquad \Big| \cdot (E + m \cdot c^2) ,$$

$$E^2 \cdot a(\vec{k}) + m \cdot c^2 \cdot E \cdot a(\vec{k}) = c^2 \cdot \hbar^2 \cdot (\vec{\sigma} \bullet \vec{k})^2 \cdot a(\vec{k}) + m \cdot c^2 \cdot E \cdot a(\vec{k}) + m^2 \cdot c^4 \cdot a(\vec{k}) ,$$

$$(E^2 - m^2 \cdot c^4) \cdot a(\vec{k}) = c^2 \cdot \hbar^2 \cdot (\vec{\sigma} \bullet \vec{k})^2 \cdot a(\vec{k}) . \tag{D25}$$

In **Anhang 4** wird nachgewiesen, dass die Beziehung $(\vec{\sigma} \bullet \vec{u}) \bullet (\vec{\sigma} \bullet \vec{v}) = \vec{u} \bullet \vec{v} \cdot 1_2 + \mathrm{i} \cdot \vec{\sigma} \bullet (\vec{u} \times \vec{v})$ gilt. Für $\vec{u} = \vec{v} = \vec{k}$ ergibt sich:

$$(\vec{\sigma} \bullet \vec{k}) \bullet (\vec{\sigma} \bullet \vec{k}) = (\vec{\sigma} \bullet \vec{k})^2 = \vec{k}^2 \cdot 1_2 . \tag{D26}$$

Formal gilt $a(\vec{k}) = \begin{pmatrix} a_1(\vec{k}) \\ a_2(\vec{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} a_1(\vec{k}) \\ a_2(\vec{k}) \end{pmatrix} = 1_2 \bullet a(\vec{k})$.

Einsetzen der letztgenannten Beziehung und von (D26) in (D25) ergibt:

$$(E^2 - m^2 \cdot c^4) \cdot 1_2 \bullet a(\vec{k}) = c^2 \cdot \hbar^2 \cdot \vec{k}^2 \cdot 1_2 \bullet a(\vec{k}) .$$

Da die Berechnung für beliebige $a(\vec{k})$ gelten soll, ergibt sich

$$E = \pm \sqrt{c^2 \cdot (\hbar \cdot \vec{k})^2 + m^2 \cdot c^4} . \tag{D27}$$

Interpretation:

Dirac betrachtete das Vorkommen negativer Energie nicht als physikalisch sinnlos, vielmehr postulierte er, dass alle Zustände mit negativer Energie mit Elektronen besetzt sind (**Dirac-See**). Durch Energiezufuhr, z. B. über ein Gammaquant kann ein Elektron aus dem gebundenen Zustand herausgelöst werden. Dabei hinterlässt es im Dirac-See eine Lücke, die wie ein Antiteilchen wirkt, d. h., das Gammaquant bewirkt die Entstehung eines **Teilchen-Antiteilchen-Paares**.

Um von den Eigenenergien (D27) zu Eigen-Zustandsfunktionen (D22) zu gelangen, wird ein Komponentenpaar der vierkomponentigen Amplitude festgelegt und damit das zweite Komponentenpaar bestimmt. Für die Festlegung des Komponentenpaars werden zweckmäßigerweise die Zustände $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ gewählt.

Diese Festlegung wird bei der Betrachtung des Mikroobjekts in einem Zentralfeld als Modellierung der Zustände „Spin up“ bzw. „Spin down“ interpretiert werden.

Fall 1: Eigen-Zustandsfunktionen mit positiver Energie $E = +\sqrt{c^2 \cdot (\hbar \cdot \vec{k})^2 + m^2 \cdot c^4}$

Nach (D22) wird in $\psi = A_+(\vec{k}) = \begin{pmatrix} a(\vec{k}) \\ b(\vec{k}) \end{pmatrix} \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i} \cdot (\vec{p} \bullet \vec{r} - E \cdot t/\hbar)}$ das Komponentenpaar $a(\vec{k})$ wie beschrieben festgelegt

und damit $b(\vec{k})$ nach (D24) bestimmt. Das ergibt die beiden Amplituden

$$A_{+\uparrow}(\vec{k}) = N \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dfrac{c \cdot \hbar \cdot \vec{\sigma} \bullet \vec{k}}{E + m \cdot c^2} \bullet \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \text{ und } A_{+\downarrow}(\vec{k}) = N \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \dfrac{c \cdot \hbar \cdot \vec{\sigma} \bullet \vec{k}}{E + m \cdot c^2} \bullet \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} . \tag{D28}$$

Mithilfe des Faktors N werden die Amplituden normiert. Um diese Normierung für $A_{+\uparrow}(\vec{k})$ vorzubereiten, wird dieser Spinor zunächst umgeformt:

$$A_{+\uparrow}(\vec{k}) = N \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dfrac{c \cdot \hbar \cdot (\sigma_1 \cdot k_1 + \sigma_2 \cdot k_2 + \sigma_3 \cdot k_3)}{E + m \cdot c^2} \bullet \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = N \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dfrac{c \cdot \hbar}{E + m \cdot c^2} \cdot \left(k_1 \cdot \sigma_1 \bullet \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + k_2 \cdot \sigma_2 \bullet \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + k_3 \cdot \sigma_3 \bullet \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \end{pmatrix}.$$

Mit $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}$ und $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ ergibt sich daraus

$$A_{+\uparrow}(\vec{k}) = N \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dfrac{c \cdot \hbar}{E + m \cdot c^2} \cdot \left(k_1 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + k_2 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \mathrm{i} \end{pmatrix} + k_3 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \end{pmatrix} = N \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dfrac{c \cdot \hbar}{E + m \cdot c^2} \cdot \begin{pmatrix} k_3 \\ k_1 + \mathrm{i} \cdot k_2 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = N \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dfrac{c \cdot \hbar}{E + m \cdot c^2} \cdot k_3 \\ \dfrac{c \cdot \hbar}{E + m \cdot c^2} \cdot (k_1 + \mathrm{i} \cdot k_2) \end{pmatrix}.$$

Damit lässt sich die Normierung realisieren:

$$1 = A_{+\uparrow}(\vec{k})^\dagger \bullet A_{+\uparrow}(\vec{k}) = N^2 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dfrac{c \cdot \hbar}{E + m \cdot c^2} \cdot k_3 & \dfrac{c \cdot \hbar}{E + m \cdot c^2} \cdot (k_1 - \mathrm{i} \cdot k_2) \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dfrac{c \cdot \hbar}{E + m \cdot c^2} \cdot k_3 \\ \dfrac{c \cdot \hbar}{E + m \cdot c^2} \cdot (k_1 + \mathrm{i} \cdot k_2) \end{pmatrix},$$

$$1 = N^2 \cdot \left(1 + 0 + \frac{c^2 \cdot \hbar^2}{(E + m \cdot c^2)^2} \cdot k_3^2 + \frac{c^2 \cdot \hbar^2}{(E + m \cdot c^2)^2} \cdot (k_1^2 + k_2^2) \right),$$

$$1 = N^2 \cdot \left(1 + \frac{c^2 \cdot \hbar^2}{(E + m \cdot c^2)^2} \cdot \vec{k}^2 \right),$$

$$1 = \frac{N^2}{(E + m \cdot c^2)^2} \cdot \left((E + m \cdot c^2)^2 + c^2 \cdot \hbar^2 \cdot \vec{k}^2 \right) \qquad \Big| \, \hbar \cdot \vec{k} = \vec{p},$$

$$1 = \frac{N^2}{(E + m \cdot c^2)^2} \cdot \left(E^2 + 2 \cdot E \cdot m \cdot c^2 + \underbrace{m^2 \cdot c^4 + c^2 \cdot \vec{p}^2}_{E^2} \right),$$

$$1 = \frac{N^2 \cdot 2 \cdot E}{(E + m \cdot c^2)^2} \cdot (E + m \cdot c^2),$$

$$N = \sqrt{\frac{E + m \cdot c^2}{2 \cdot E}}.$$

Für $v \ll c$ (nichtrelativistischer Fall) ist das obere Komponentenpaar in (D28) wesentlich größer als das untere, da $\dfrac{c \cdot \hbar \cdot \vec{\sigma} \bullet \vec{k}}{E + m \cdot c^2} = \dfrac{c \cdot \vec{\sigma} \bullet \vec{p}}{E + m \cdot c^2} \approx \dfrac{c \cdot p}{m \cdot c^2} = \dfrac{c \cdot m \cdot v}{m \cdot c^2} = \dfrac{v}{c} \ll 1$.

Fall 2: Eigen-Zustandsfunktionen mit negativer Energie $E = -\sqrt{c^2 \cdot (\hbar \cdot \vec{k})^2 + m^2 \cdot c^4}$

Analog zum Fall 1 wird nun in $\psi = A_{-}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} a(\vec{k}) \\ b(\vec{k}) \end{pmatrix} \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}\cdot(\vec{p}\bullet\vec{r} - E\cdot t/\hbar)}$ das Komponentenpaar $b(\vec{k})$ wie beschrieben festgelegt und damit $a(\vec{k})$ mithilfe der ersten Gleichung des Gleichungssystems (D23) bestimmt. Das ergibt die beiden Amplituden

$$A_{-\uparrow}(\vec{k}) = N \cdot \begin{pmatrix} \frac{c\cdot\hbar\cdot\vec{\sigma}\bullet\vec{k}}{E - m\cdot c^2} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad A_{-\downarrow}(\vec{k}) = N \cdot \begin{pmatrix} \frac{c\cdot\hbar\cdot\vec{\sigma}\bullet\vec{k}}{E - m\cdot c^2} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{D29}$$

Die Normierung liefert $N = \sqrt{\frac{E - m\cdot c^2}{2\cdot E}} > 0$, da $E < 0$.

Für $v \ll c$ (nichtrelativistischer Fall) ist das untere Komponentenpaar in (D29) wesentlich größer als das obere.

2.2 Dirac-Gleichung für Mikroobjekte in externen elektromagnetischen Feldern

Die Interaktion eines geladenen Mikroobjekts mit einem externen elektromagnetischen Feld wird als **Kopplung** oder **Wechselwirkung** mit diesem Feld bezeichnet. Bei der minimalen Kopplung werden die einfachsten möglichen Energieterme für das elektrische und das magnetische Feld in die Operator- oder Größengleichung zur Beschreibung der Energiezustände eines Mikroobjekts (z. B. Schrödinger-Gleichung, Dirac-Gleichung) eingefügt.

Die für die Kopplung benötigten Beziehungen wurden im Buch erarbeitet:

- (2.23): $\vec{E}(\vec{r}) = -\mathrm{grad}\,\varphi(\vec{r})$ … elektrische Feldstärke, φ ist das Potential des elektrischen Feldes,
- (2.26): $E_{\mathrm{pot}}(\vec{r}) = V(\vec{r}) = q\cdot\varphi(\vec{r})$ … potenzielle Energie des elektrischen Feldes an der Stelle $\vec{r}$,
  q ist die Probeladung,
- (2.27): $\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{4\cdot\pi\cdot\varepsilon}\cdot\frac{Q}{r}$ … Potential einer Punktladung Q im Abstand r
- (3.71): $\vec{B} = \nabla\times\vec{A}$ … Einführung des Vektorpotentials $\vec{A}$,
- (3.72): $\vec{E} = -\nabla\Phi - \dot{\vec{A}}$ … Einführung des elektrodynamischen Potentials Φ;
  für $\dot{\vec{A}} = 0$ gilt $\vec{E} = -\nabla\Phi$, d. h., in diesem Fall geht Φ in φ über.

In der vorliegenden Quelle wird auf S. 103 die minimale Kopplung an ein elektromagnetisches Feld folgendermaßen realisiert:

$$E = \mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial t} \quad\rightarrow\quad \mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial t} - e\cdot\Phi(\vec{r}), \tag{D30}$$

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla \quad\rightarrow\quad \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla - \frac{e}{c}\cdot\vec{A}(\vec{r}). \tag{D31}$$

Mit der Ladung $q = -e$ für das Elektron ist (D30) nachvollziehbar, doch bei (D31) tritt eine Abweichung zur Definition des Vektorpotentials $\vec{A}$ im Buch auf, da in der hier verwendeten Quelle nicht mit SI-Einheiten gearbeitet wird.

Einsetzen von (D30) und (D31) in (D4) ergibt:

$$\left(\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial t}-e\cdot\Phi(\vec{r})\right)\psi(\vec{r},t)=\left(c\cdot\vec{\alpha}\bullet\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\cdot\vec{A}(\vec{r})\right)+\beta\cdot m\cdot c^2\right)\psi(\vec{r},t),$$

$$\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t}=\left(c\cdot\vec{\alpha}\bullet\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\cdot\vec{A}(\vec{r})\right)+\beta\cdot m\cdot c^2+e\cdot\Phi(\vec{r})\right)\psi(\vec{r},t)=H_{\text{Dirac}}\,\psi(\vec{r},t) \tag{D32}$$

… **Dirac-Gleichung für ein Mikroobjekt in einem elektromagnetischen Feld (Formulierung als Operatorgleichung)**.

In den nächsten Unterabschnitten werden die Sonderfälle der Dirac-Gleichung für Mikroobjekte in einem Zentralfeld und für nichtrelativistische Mikroobjekte betrachtet. Der zweitgenannte Sonderfall wird zur Pauli-Gleichung führen.

2.2.1 Dirac-Gleichung für Mikroobjekte in einem Zentralfeld

Schritt 1: Modellierung des Spins für Elektronen

Im Buch wird im Rahmen der nichtrelativistischen Quantenmechanik der Spin des Elektrons als zweckmäßige Erweiterung des Bahndrehimpulses eingeführt, um das Ergebnis des Stern-Gerlach-Versuchs zu modellieren.

In der hier thematisierten relativistischen Quantenmechanik wird analog vorgegangen. Dazu wird ebenfalls vom Bahndrehimpuls ausgegangen und eine Erweiterung zu einem Gesamt-Drehimpuls vorgenommen, dessen Operator mit dem Dirac-Hamiltonian kommutiert, denn erst unter dieser Bedingung ist der Gesamt-Drehimpuls eine Erhaltungsgröße, für die eine Drehimpuls-Quantenzahl definiert werden kann (s. S. 448 in meinem Buch).

Der für die Kommutator-Berechnung benötigte Dirac-Hamiltonian ergibt sich aus (D32) unter der für ein elektrisches Zentralfeld gültigen Bedingung $\vec{A}=0$, außerdem wird beachtet, dass wegen $\vec{A}=0$ das elektrodynamische Potential Φ in das Potential des elektrischen Feldes φ übergeht:

$$\mathrm{E}\,\psi(\vec{r},t)=\left(\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(\vec{r},t)=\left(c\cdot\vec{\alpha}\bullet\vec{p}+\beta\cdot m\cdot c^2+e\cdot\varphi(\vec{r})\right)\psi(\vec{r},t)=H_{\text{Dirac}}\,\psi(\vec{r},t) \tag{D33}$$

… **Dirac-Gleichung für ein Mikroobjekt in einem Zentralfeld (Formulierung als Operatorgleichung)**.

Als Drehimpulsoperator wird zuerst der Dreier-Bahndrehimpuls-Operator $\vec{L}=\hat{\vec{r}}\times\vec{p}$ mit $L_i=\varepsilon^{ijk}\cdot\hat{r}_j\cdot p_k$ (Verwendung der Einstein'schen Summenkonvention) betrachtet. Für die Berechnung des Kommutators wird Kommutator-Algebra verwendet, außerdem werden Beziehungen genutzt, die im Teil „Drehimpuls und Spin" des Bonusmaterials angegeben werden:

$$\left[L_i,H_{\text{Dirac}}\right]=\left[\varepsilon^{ijk}\cdot\hat{r}_j\cdot p_k,\,c\cdot\vec{\alpha}\bullet\vec{p}+\beta\cdot m\cdot c^2+e\cdot\varphi(\vec{r})\right],$$

$$\left[L_i,H_{\text{Dirac}}\right]=\varepsilon^{ijk}\cdot c\cdot\left[\hat{r}_j\cdot p_k,\,\vec{\alpha}\bullet\vec{p}\right]+\varepsilon^{ijk}\cdot\left[\hat{r}_j\cdot p_k,\,\beta\cdot m\cdot c^2\right]+\varepsilon^{ijk}\cdot e\cdot\left[\hat{r}_j\cdot p_k,\,\varphi(\vec{r})\right].$$

Mit $\left[\hat{r}_j\cdot p_k,\,\beta\cdot m\cdot c^2\right]=0$ und wegen $\varphi(\vec{r})=\varphi(r)$ auch $\left[\hat{r}_j\cdot p_k,\,\varphi(\vec{r})\right]=0$ ergibt sich weiter:

$$\left[L_i,H_{\text{Dirac}}\right]=\varepsilon^{ijk}\cdot c\cdot\left[\hat{r}_j\cdot p_k,\,\alpha_l\cdot p_l\right]=\varepsilon^{ijk}\cdot c\cdot\alpha_l\cdot\left[\hat{r}_j\cdot p_k,\,p_l\right]\qquad\Big|\,[a\cdot b,c]=[a,c]b+a[b,c],$$

$$\left[L_i,H_{\text{Dirac}}\right]=\varepsilon^{ijk}\cdot c\cdot\alpha_l\cdot\underbrace{\left[\hat{r}_j,\,p_l\right]}_{\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\delta_{jl}}\cdot p_k+\varepsilon^{ijk}\cdot c\cdot\alpha_l\cdot\hat{r}_j\cdot\underbrace{\left[p_k,\,p_l\right]}_{0},$$

$$\left[L_i,H_{\text{Dirac}}\right]=\varepsilon^{ijk}\cdot c\cdot\alpha_l\cdot\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\delta_{jl}\cdot p_k=\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot c\cdot\varepsilon^{ilk}\cdot\alpha_l\cdot p_k,$$

$$\left[L_i,H_{\text{Dirac}}\right]=\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot c\cdot\left(\vec{\alpha}\times\vec{p}\right)_i\neq 0.$$

Da der berechnete Kommutator ungleich null ist, stellt der Dreier-Bahndrehimpuls $\vec{L}$ keine Erhaltungsgröße dar. In der nichtrelativistischen Quantenmechanik ermöglichte die Erweiterung von $\vec{L}$ um den Spin zu

$\vec{L}+\vec{S}=\vec{L}+\frac{\hbar}{2}\cdot\vec{\sigma}$ eine erfolgreiche Modellierung des experimentellen Ergebnisses. Deshalb liegt in der relativistischen Quantenmechanik ein analoges Vorgehen nahe.

Mit $\sigma_i'=\begin{pmatrix}\sigma_i & \mathbb{O}_2\\ \mathbb{O}_2 & \sigma_i\end{pmatrix}$ und $\vec{\sigma}'=(\sigma_1',\sigma_2',\sigma_3')$ … **Vektor der Spin-Operatoren** ergibt sich:

$$\left[L_i+\frac{\hbar}{2}\cdot\sigma_i', H_{\text{Dirac}}\right]=\left[L_i, H_{\text{Dirac}}\right]+\left[\frac{\hbar}{2}\cdot\sigma_i', H_{\text{Dirac}}\right]=\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot c\cdot\left(\vec{\alpha}\times\vec{p}\right)_i+\left[\frac{\hbar}{2}\cdot\sigma_i', c\cdot\alpha_l\cdot p_l+\beta\cdot m\cdot c^2+e\cdot\varphi(\vec{r})\right],$$

$$\left[L_i+\frac{\hbar}{2}\cdot\sigma_i', H_{\text{Dirac}}\right]=\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot c\cdot\left(\vec{\alpha}\times\vec{p}\right)_i+\frac{\hbar\cdot c}{2}\cdot\left[\sigma_i', \alpha_l\cdot p_l\right]+\frac{\hbar\cdot m\cdot c^2}{2}\left[\sigma_i', \beta\right]+\frac{\hbar}{2}\cdot e\cdot\underbrace{\left[\sigma_i', \varphi(\vec{r})\right]}_{0}.$$

Mit $[a,b\cdot c]=[a,b]c+b[a,c]$ erhalten wir

$$\left[L_i+\frac{\hbar}{2}\cdot\sigma_i', H_{\text{Dirac}}\right]=\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot c\cdot\left(\vec{\alpha}\times\vec{p}\right)_i+\frac{\hbar\cdot c}{2}\cdot\left[\sigma_i', \alpha_l\right]\cdot p_l+\frac{\hbar\cdot c}{2}\cdot\alpha_l\cdot\underbrace{\left[\sigma_i', p_l\right]}_{0}+\frac{\hbar\cdot m\cdot c^2}{2}\left[\sigma_i', \beta\right].$$

NR 1: Berechnung von $\left[\sigma_i', \alpha_l\right]$ unter Verwendung von (D20), d. h. $\left[\sigma_i, \sigma_j\right]=2\cdot\mathrm{i}\cdot\varepsilon^{ijk}\cdot\sigma_k$:

$$\left[\sigma_i', \alpha_l\right]=\begin{pmatrix}\sigma_i & \mathbb{O}\\ \mathbb{O} & \sigma_i\end{pmatrix}\bullet\begin{pmatrix}\mathbb{O} & \sigma_l\\ \sigma_l & \mathbb{O}\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}\mathbb{O} & \sigma_l\\ \sigma_l & \mathbb{O}\end{pmatrix}\bullet\begin{pmatrix}\sigma_i & \mathbb{O}\\ \mathbb{O} & \sigma_i\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathbb{O} & \sigma_i\bullet\sigma_l\\ \sigma_i\bullet\sigma_l & \mathbb{O}\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}\mathbb{O} & \sigma_l\bullet\sigma_i\\ \sigma_l\bullet\sigma_i & \mathbb{O}\end{pmatrix},$$

$$\left[\sigma_i', \alpha_l\right]=\begin{pmatrix}\mathbb{O} & \left[\sigma_i, \sigma_l\right]\\ \left[\sigma_i, \sigma_l\right] & \mathbb{O}\end{pmatrix}=2\cdot\mathrm{i}\cdot\varepsilon^{ilk}\cdot\begin{pmatrix}\mathbb{O} & \sigma_k\\ \sigma_k & \mathbb{O}\end{pmatrix}=2\cdot\mathrm{i}\cdot\varepsilon^{ilk}\cdot\alpha_k.$$

NR 2: Berechnung von $\left[\sigma_i', \beta\right]$

$$\left[\sigma_i', \beta\right]=\begin{pmatrix}\sigma_i & \mathbb{O}\\ \mathbb{O} & \sigma_i\end{pmatrix}\bullet\begin{pmatrix}1 & \mathbb{O}\\ \mathbb{O} & -1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}1 & \mathbb{O}\\ \mathbb{O} & -1\end{pmatrix}\bullet\begin{pmatrix}\sigma_i & \mathbb{O}\\ \mathbb{O} & \sigma_i\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\sigma_i & \mathbb{O}\\ \mathbb{O} & -\sigma_i\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}\sigma_i & \mathbb{O}\\ \mathbb{O} & -\sigma_i\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathbb{O}_2 & \mathbb{O}_2\\ \mathbb{O}_2 & \mathbb{O}_2\end{pmatrix}=\mathbb{O}_4.$$

Weiter in der Hauptrechnung:

$$\left[L_i+\frac{\hbar}{2}\cdot\sigma_i', H_{\text{Dirac}}\right]=\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot c\cdot\left(\vec{\alpha}\times\vec{p}\right)_i+\frac{\hbar\cdot c}{2}\cdot 2\cdot\mathrm{i}\cdot\varepsilon^{ilk}\cdot\alpha_k\cdot p_l \qquad \middle|\ \varepsilon^{ilk}=-\varepsilon^{ikl},$$

$$\left[L_i+\frac{\hbar}{2}\cdot\sigma_i', H_{\text{Dirac}}\right]=\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot c\cdot\left(\vec{\alpha}\times\vec{p}\right)_i-\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot c\cdot\varepsilon^{ikl}\cdot\alpha_k\cdot p_l=\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot c\cdot\left(\vec{\alpha}\times\vec{p}\right)_i-\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot c\cdot\left(\vec{\alpha}\times\vec{p}\right)_i=0.$$

Ergebnis: Wegen $0=\left[\vec{L}+\frac{\hbar}{2}\cdot\vec{\sigma}', H_{\text{Dirac}}\right]=:\left[\vec{J}, H_{\text{Dirac}}\right]$ existiert eine Erhaltungsgröße $\vec{L}+\frac{\hbar}{2}\cdot\vec{\sigma}'=\vec{L}+\vec{S}'=:\vec{J}$, die den Gesamt-Drehimpuls beschreibt. Dieser Erhaltungsgröße kann eine Drehimpuls-Quantenzahl j zugeordnet werden.

Fazit: Die Analogiebetrachtung zur nichtrelativistischen Quantenmechanik war erfolgreich.

Es gelten $\left[\vec{J}, H_{\text{Dirac}}\right]=\left[J_i, H_{\text{Dirac}}\right]=\left[J_i, J^2\right]=0$. Deshalb besitzen die Operatoren H_{Dirac}, J_i und J^2 ein gemeinsames VONS, dessen Zustände durch einen Satz einheitlicher Quantenzahlen charakterisiert werden können.

Bemerkung: Wegen $\left[J_i, J_j\right]=\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\varepsilon^{ijk}\cdot J_k$ besitzen die Komponenten des Gesamt-Drehimpuls-Operators keine gemeinsamen Eigenzustände und können nicht gleichzeitig genau gemessen werden. Dies stellt eine Analogie zum nichtrelativistischen Fall dar, s. Abschn. 4.4.4 des Buchs.

Schritt 2: Berechnung der Energieniveaus im Zentralfeld eines Atomkerns

Wie in Abschn. 1 vorgestellt, besitzen die Operatoren E und $\vec{p}$ wegen $\left[\mathrm{E}, \vec{p}\right] = \left[\mathrm{E}, H_\mathrm{D}\right] = 0$ ein gemeinsames System von Eigenzuständen (ein vollständiges Orthonormalsystem, d. h. ein VONS), in dem Eigenwertgleichungen gelten, die zu folgender Größengleichung führen:

$$E \cdot \psi\left(\vec{r}, t\right) = \left(c \cdot \vec{\alpha} \bullet \vec{p} + \beta \cdot m \cdot c^2 + e \cdot \varphi\left(\vec{r}\right)\right) \psi\left(\vec{r}, t\right) .$$

Mit dem Separationsansatz $\psi\left(\vec{r}, t\right) = \phi\left(\vec{r}\right) \cdot \mathrm{e}^{-\mathrm{i} \cdot E \cdot t/\hbar}$ geht die letztgenannte Gleichung über in

$$E \cdot \phi\left(\vec{r}\right) = \left(c \cdot \vec{\alpha} \bullet \vec{p} + \beta \cdot m \cdot c^2 + e \cdot \varphi\left(\vec{r}\right)\right) \phi\left(\vec{r}\right) . \tag{D34}$$

Speziell ergibt sich die potenzielle Energie eines Elektrons im Zentralfeld eines Kerns:

$$E_\mathrm{pot}\left(r\right) = V\left(r\right) = q \cdot \varphi\left(r\right) \qquad \left| \varphi\left(r\right) = \frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon} \cdot \frac{Q}{r} ; q = -\left|e\right| ; Q = Z \cdot \left|e\right| \right. ,$$

$$E_\mathrm{pot}\left(r\right) = V\left(r\right) = -\left|e\right| \cdot \frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon} \cdot \frac{Z \cdot \left|e\right|}{r} = -\frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon} \cdot \frac{Z \cdot e^2}{r} .$$

Die potenzielle Energie wird in (D34) eingesetzt (in der vorliegenden Quelle wird dabei der Faktor $\frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon}$ weggelassen, da sie keine SI-Einheiten verwendet). So entsteht eine Bestimmungsgleichung für die Energieniveaus eines Elektrons im Coulomb-Potenzial eines Kerns. Das kompliziert aussehende Ergebnis wird lediglich mitgeteilt.

2.2.2 Dirac-Gleichung für nichtrelativistische Mikroobjekte

In der Dirac-Gleichung (D32) für ein Mikroobjekt in einem elektromagnetischen Feld wird der Lösungsansatz (D22) verwendet, d. h.

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1\left(\vec{k}\right) \\ A_2\left(\vec{k}\right) \\ A_3\left(\vec{k}\right) \\ A_4\left(\vec{k}\right) \end{pmatrix} \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i} \cdot \left(\vec{p} \bullet \vec{r} - E \cdot t/\hbar\right)} = \begin{pmatrix} a\left(\vec{k}\right) \\ b\left(\vec{k}\right) \end{pmatrix} \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i} \cdot \left(\vec{p} \bullet \vec{r} - E \cdot t/\hbar\right)} = \begin{pmatrix} a\left(\vec{k}\right) \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i} \cdot \left(\vec{p} \bullet \vec{r} - E \cdot t/\hbar\right)} \\ b\left(\vec{k}\right) \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i} \cdot \left(\vec{p} \bullet \vec{r} - E \cdot t/\hbar\right)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} . \tag{D35}$$

Dieser Ansatz führt mit $\vec{\alpha} = \vec{\sigma} \bullet \begin{pmatrix} \mathrm{O}_2 & 1_2 \\ 1_2 & \mathrm{O}_2 \end{pmatrix}$ und $\beta = \begin{pmatrix} 1_2 & \mathrm{O}_2 \\ \mathrm{O}_2 & -1_2 \end{pmatrix}$ sowie mit $e \cdot \Phi\left(\vec{r}\right) = V$ zu:

$$\mathrm{i} \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \psi\left(\vec{r}, t\right)}{\partial t} = \left(c \cdot \vec{\alpha} \bullet \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \cdot \vec{A}\left(\vec{r}\right)\right) + \beta \cdot m \cdot c^2 + e \cdot \Phi\left(\vec{r}\right)\right) \psi\left(\vec{r}, t\right) ,$$

$$\mathrm{i} \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \left(c \cdot \vec{\alpha} \bullet \underbrace{\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \nabla - \frac{e}{c} \cdot \vec{A}\left(\vec{r}\right)\right)}_{\vec{\pi}} + \beta \cdot m \cdot c^2 + V\right) \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} ,$$

$$\mathrm{i} \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = c \cdot \vec{\sigma} \bullet \begin{pmatrix} \mathrm{O}_2 & 1_2 \\ 1_2 & \mathrm{O}_2 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} \vec{\pi} \cdot \phi \\ \vec{\pi} \cdot \chi \end{pmatrix} + m \cdot c^2 \cdot \begin{pmatrix} 1_2 & \mathrm{O}_2 \\ \mathrm{O}_2 & -1_2 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} + V \cdot \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} ,$$

$$\mathrm{i} \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = c \cdot \vec{\sigma} \bullet \begin{pmatrix} \vec{\pi} \cdot \chi \\ \vec{\pi} \cdot \phi \end{pmatrix} + m \cdot c^2 \cdot \begin{pmatrix} \phi \\ -\chi \end{pmatrix} + V \cdot \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} .$$

Die letztgenannte Gleichung lässt sich in Form von zwei gekoppelten DGL darstellen:

$$\left.\begin{array}{lcl} \mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\dot{\phi} & = & c\cdot\vec{\sigma}\bullet\vec{\pi}\cdot\chi+\left(V+m\cdot c^2\right)\cdot\phi \\ \mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\dot{\chi} & = & c\cdot\vec{\sigma}\bullet\vec{\pi}\cdot\phi+\left(V-m\cdot c^2\right)\cdot\chi \end{array}\right| .$$

Die linken Seiten der beiden DGL lassen sich umformen, wenn berücksichtigt wird, dass die Dirac-Gleichung (als Ausgangspunkt dieser Betrachtungen) von ebenen Wellen gelöst wird:

$$\psi=\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a(\vec{k})\\ b(\vec{k})\end{pmatrix}\cdot e^{\mathrm{i}\cdot\left(\vec{k}\bullet\vec{r}-E\cdot t/\hbar\right)},$$

$$\dot{\psi}=\begin{pmatrix}\dot{\phi}\\ \dot{\chi}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a(\vec{k})\\ b(\vec{k})\end{pmatrix}\cdot e^{\mathrm{i}\cdot\left(\vec{k}\bullet\vec{r}-E\cdot t/\hbar\right)}\cdot\left(-\mathrm{i}\cdot E/\hbar\right),$$

$$\left.\begin{array}{lcl} \dot{\phi} & = & \left(-\mathrm{i}\cdot E/\hbar\right)\cdot\phi \\ \dot{\chi} & = & \left(-\mathrm{i}\cdot E/\hbar\right)\cdot\chi \end{array}\right| .$$

Einsetzen dieser Beziehungen in die beiden gekoppelten DGL ergibt

$$\left.\begin{array}{lcl} E\cdot\phi & = & c\cdot\vec{\sigma}\bullet\vec{\pi}\cdot\chi+\left(V+m\cdot c^2\right)\cdot\phi \\ E\cdot\chi & = & c\cdot\vec{\sigma}\bullet\vec{\pi}\cdot\phi+\left(V-m\cdot c^2\right)\cdot\chi \end{array}\right| . \qquad \text{(D36)}$$

Im Folgenden wird der **Sonderfall eines nichtrelativistischen Mikroobjektes** mit positiver Energie $0<E\ll m\cdot c^2$ betrachtet, dessen Wellenfunktion durch (D35) und (D28) beschrieben wird, d. h. durch

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}A_1(\vec{k})\\ A_2(\vec{k})\\ A_3(\vec{k})\\ A_4(\vec{k})\end{pmatrix}\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}\cdot\left(\vec{p}\bullet\vec{r}-E\cdot t/\hbar\right)}=\begin{pmatrix}a(\vec{k})\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}\cdot\left(\vec{p}\bullet\vec{r}-E\cdot t/\hbar\right)}\\ b(\vec{k})\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}\cdot\left(\vec{p}\bullet\vec{r}-E\cdot t/\hbar\right)}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix} \text{ mit}$$

$$A_{+\uparrow}(\vec{k})=N\cdot\begin{pmatrix}1\\ 0\\ \dfrac{c\cdot\hbar\cdot\vec{\sigma}\bullet\vec{k}}{E+m\cdot c^2}\cdot\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\end{pmatrix} \text{ und } A_{+\downarrow}(\vec{k})=N\cdot\begin{pmatrix}0\\ 1\\ \dfrac{c\cdot\hbar\cdot\vec{\sigma}\bullet\vec{k}}{E+m\cdot c^2}\cdot\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\end{pmatrix}.$$

Folgende Abschätzung zeigt, dass für diesen Sonderfall der Term $\dfrac{c\cdot\hbar\cdot\vec{\sigma}\bullet\vec{k}}{E+m\cdot c^2}$ vernachlässigbar ist:

$$\frac{c\cdot\hbar\cdot\vec{\sigma}\bullet\vec{k}}{E+m\cdot c^2}=\frac{c\cdot\vec{\sigma}\bullet\vec{p}}{E+m\cdot c^2}\approx\frac{c\cdot p}{m\cdot c^2}=\frac{c\cdot m\cdot v}{m\cdot c^2}=\frac{v}{c}\ll 1.$$

Deshalb ist das zweite Komponentenpaar χ gegenüber dem ersten Komponentenpaar ϕ vernachlässigbar und es kann von einem vier- zu einem zweikomponentigen Spinor übergegangen werden. Dazu wird χ mithilfe der zweiten Gleichung von (D36) abgeschätzt und in die erste Gleichung eingesetzt:

$$E\cdot\chi=c\cdot\vec{\sigma}\bullet\vec{\pi}\cdot\phi+\left(V-m\cdot c^2\right)\cdot\chi \qquad \left|+2\cdot m\cdot c^2\cdot\chi-E\cdot\chi\right.,$$

$$2\cdot m\cdot c^2\cdot\chi=c\cdot\vec{\sigma}\bullet\vec{\pi}\cdot\phi+\left(V+m\cdot c^2-E\right)\cdot\chi=c\cdot\vec{\sigma}\bullet\vec{\pi}\cdot\phi-\left(E-m\cdot c^2-V\right)\cdot\chi,$$

$$\chi=\frac{\vec{\sigma}\bullet\vec{\pi}\cdot\phi}{2\cdot m\cdot c}-\frac{E-m\cdot c^2-V}{2\cdot m\cdot c^2}\cdot\chi.$$

Mit der Abschätzung $\dfrac{E-m\cdot c^2-V}{2\cdot m\cdot c^2}=\dfrac{E_{\mathrm{kin}}}{2\cdot m\cdot c^2}=\dfrac{p^2}{2\cdot m}\cdot\dfrac{1}{2\cdot m\cdot c^2}=\dfrac{v^2}{4\cdot c^2}\ll 1$ ergibt sich $\chi\approx\dfrac{\vec{\sigma}\bullet\vec{\pi}\cdot\phi}{2\cdot m\cdot c}$.

Dieser Term wird in die erste Gleichung von (D36) eingesetzt:

$$E \cdot \phi = c \cdot \vec{\sigma} \bullet \vec{\pi} \cdot \chi + \left(V + m \cdot c^2\right) \cdot \phi \qquad \Big| \chi \approx \frac{\vec{\sigma} \bullet \vec{\pi} \cdot \phi}{2 \cdot m \cdot c},$$

$$E \cdot \phi = \left(\frac{\left(\vec{\sigma} \bullet \vec{\pi}\right)^2}{2 \cdot m} + V + m \cdot c^2 \right) \cdot \phi \,. \tag{D37}$$

Im Teil „Drehimpuls und Spin“ des Bonusmaterials wird gezeigt, dass zwischen dem nichtrelativistischen Spin-Operator $\vec{S}$ und dem Vektor der Pauli-Matrizen $\vec{\sigma}$ die Beziehung $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \cdot \vec{\sigma}$ besteht. Durch Substitution der in **Anhang 5** hergeleiteten Beziehung $\left(\vec{\sigma} \bullet \vec{\pi}\right)^2 = \vec{\pi}^2 - \frac{\hbar \cdot e}{c} \cdot \vec{\sigma} \bullet \vec{B}$, des Vektors der Pauli-Matrizen $\vec{\sigma}$ und des kanonischen Impulses $\vec{\pi} = \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \nabla - \frac{e}{c} \cdot \vec{A}(\vec{r}) \right)$ in (D37) ergibt sich:

$$E \cdot \phi = \left(\frac{1}{2 \cdot m} \cdot \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \nabla - \frac{e}{c} \cdot \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 - \frac{\hbar \cdot e}{2 \cdot m \cdot c} \cdot \vec{\sigma} \bullet \vec{B} + V + m \cdot c^2 \right) \cdot \phi \qquad \Big| \vec{\sigma} = \frac{2 \cdot \vec{S}}{\hbar},$$

$$\begin{aligned} E \cdot \phi &= \left(\frac{1}{2 \cdot m} \cdot \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \nabla - \frac{e}{c} \cdot \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 - \frac{2 \cdot e}{2 \cdot m \cdot c} \cdot \vec{S} \bullet \vec{B} + V + m \cdot c^2 \right) \cdot \phi \\ &= \left(\frac{1}{2 \cdot m} \cdot \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \nabla - \frac{e}{c} \cdot \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 - \frac{g_s \cdot e}{2 \cdot m \cdot c} \cdot \vec{S} \bullet \vec{B} + V + m \cdot c^2 \right) \cdot \phi \end{aligned} \tag{D38}$$

… **Pauli-Gleichung als nichtrelativistischer Grenzfall der Dirac-Gleichung**.

In der zweiten Fassung der Pauli-Gleichung wurde der Spin-g-Faktor g_s eingeführt, der den Wert zwei hat.

Durch Weglassen der Felder $\vec{A}$ und $\vec{B}$ sowie Messen der potenziellen Energie relativ zur Ruheenergie geht die Pauli-Gleichung in die **Schrödinger-Gleichung** über.

In der verwendeten Quelle wird der Spinor der Pauli-Gleichung normiert und es wird die Näherung verfeinert, indem die Beziehung $\chi \approx \frac{\vec{\sigma} \bullet \vec{\pi} \cdot \phi}{2 \cdot m \cdot c}$ in $\chi = \frac{\vec{\sigma} \bullet \vec{\pi} \cdot \phi}{2 \cdot m \cdot c} - \frac{E - m \cdot c^2 - V}{2 \cdot m \cdot c^2} \cdot \chi$ eingesetzt wird, d. h., es wird $\chi = \frac{\vec{\sigma} \bullet \vec{\pi} \cdot \phi}{2 \cdot m \cdot c} - \frac{E - m \cdot c^2 - V}{2 \cdot m \cdot c^2} \cdot \frac{\vec{\sigma} \bullet \vec{\pi} \cdot \phi}{2 \cdot m \cdot c}$ verwendet. Eine aufwendige Rechnung ergibt die relativistisch korrigierte Pauli-Gleichung.

2.3 Lorentz-kovariante Form der Dirac-Gleichung

Um die Lorentz-Kovarianz der Dirac-Gleichung zu zeigen, wird sie in vierdimensionale Notation überführt, analog zu den Vierervektoren in der relativistischen Mechanik und Elektrodynamik. Diese Transformation erfolgt zunächst für die Operatorgleichung eines freien Mikroobjekts und wird danach durch minimale Kopplung der elektromagnetischen Potenziale verallgemeinert.

Um das gewünschte Ziel zu erreichen, wird (D4) von links mit β/c multipliziert, zuvor wird die Dirac-Gleichung etwas umgeformt:

$$\left(\mathrm{i} \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} - c \cdot \vec{\alpha} \bullet \vec{p} - \beta \cdot m \cdot c^2 \right) \psi\left(\vec{r}, t\right) = 0 \,,$$

$$\left(\mathrm{i} \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} - c \cdot \sum_{i=1}^{3} \alpha_i \cdot p_i - \beta \cdot m \cdot c^2 \right) \psi\left(\vec{r}, t\right) = 0 \qquad \Big| p_i = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \cdot \frac{\partial}{\partial x^i} = -\mathrm{i} \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial x^i} \,,$$

$$\left(\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot c\cdot\sum_{i=1}^{3}\alpha_i\cdot\frac{\partial}{\partial x^i}-\beta\cdot m\cdot c^2\right)\psi\left(\vec{r},t\right)=0 \qquad \Big|\ \frac{\beta}{c}\cdot\,,$$

$$\left(\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\beta\cdot\frac{\partial}{\partial(c\cdot t)}+\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\sum_{i=1}^{3}\beta\bullet\alpha_i\cdot\frac{\partial}{\partial x^i}-\beta^2\cdot m\cdot c\right)\psi\left(\vec{r},t\right)=0\,.$$

In der Literatur ist es üblich, auf das Mitführen der Einheitsmatrix $\beta^2=1$ zu verzichten:

$$\left(\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\beta\cdot\frac{\partial}{\partial(c\cdot t)}+\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\sum_{i=1}^{3}\beta\bullet\alpha_i\cdot\frac{\partial}{\partial x^i}-m\cdot c\right)\psi\left(\vec{r},t\right)=0\,. \tag{D39}$$

Es werden folgende **Dirac'sche Gamma-Matrizen** eingeführt:

$$\gamma^0=\beta=\begin{pmatrix}1_2 & 0_2\\ 0_2 & -1_2\end{pmatrix},\ \gamma^i=\beta\bullet\alpha_i=\begin{pmatrix}1_2 & 0_2\\ 0_2 & -1_2\end{pmatrix}\bullet\begin{pmatrix}0_2 & \sigma_i\\ \sigma_i & 0_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0_2 & \sigma_i\\ -\sigma_i & 0_2\end{pmatrix}=\sigma_i\bullet\begin{pmatrix}0_2 & 1_2\\ -1_2 & 0_2\end{pmatrix}. \tag{D40}$$

Einsetzen von (D40) in (D39) ergibt:

$$\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\left(\gamma^0\cdot\frac{\partial}{\partial x^0}+\gamma^1\cdot\frac{\partial}{\partial x^1}+\gamma^2\cdot\frac{\partial}{\partial x^2}+\gamma^3\cdot\frac{\partial}{\partial x^3}\right)\psi-m\cdot c\cdot\psi=0\,.$$

Mit dem **matrixwertigen Vierervektor** $\left(\gamma^\mu\right)=\left(\gamma^0,\gamma^1,\gamma^2,\gamma^3\right)^T$ und der Beziehung $\frac{\partial}{\partial x^\mu}=\partial_\mu$ kann die letztgenannte Gleichung geschrieben werden als

$$\left(\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\gamma^\mu\cdot\partial_\mu-m\cdot c\right)\psi=0 \quad\ldots \tag{D41}$$ **Dirac-Gleichung (Formulierung mit Gamma-Matrizen)**.

Für das Skalarprodukt eines beliebigen Vierervektors $\left(A_\mu\right)$ mit dem Vierervektor der Gamma-Matrizen $\left(\gamma^\mu\right)$ führte Feynman mit dem **Feynman-Slash** folgende Kurzschreibweise ein:

$$\gamma^\mu\cdot A_\mu=g_{\mu\nu}\cdot\gamma^\mu\cdot A^\nu=\gamma^0\cdot A^0-\sum_{i=1}^{3}\gamma^i\cdot A^i=\gamma^0\cdot A^0-\vec{\gamma}\bullet\vec{A}=:\not{A}\,. \tag{D42}$$

Mit $p_\mu=\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial x^\mu}=\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\partial_\mu$ und (D42) schreibt sich (D41) als

$$\left(\mathrm{i}\cdot\hbar\cdot\not{\partial}-m\cdot c\right)\psi=\left(\not{p}-m\cdot c\right)\psi=0 \quad\ldots \tag{D43}$$ **Dirac-Gleichung (Formulierung mit Feynman-Slash)**.

Verallgemeinerung durch minimale Kopplung der elektromagnetischen Potenziale ergibt

$$\left(\not{p}-\frac{e}{c}\cdot\not{A}-m\cdot c\right)\psi=0 \quad\ldots \tag{D44}$$ **Dirac-Gleichung (allgemeine Formulierung)**.

Bemerkung 1

Die Algebra der Gamma-Matrizen lautet:

$$\left\{\gamma^\mu,\gamma^\nu\right\}=\gamma^\mu\bullet\gamma^\nu+\gamma^\nu\bullet\gamma^\mu=2\cdot g^{\mu\nu}\cdot 1_4\,,$$

γ^0 ist hermitesch und unitär, d. h., es gelten $\left(\gamma^0\right)^\dagger=\gamma^0$ und $\left(\gamma^0\right)^{-1}=\left(\gamma^0\right)^\dagger$,

γ^i mit $i=1,2,3$ sind antihermitesch und unitär, d. h., es gelten $\left(\gamma^i\right)^\dagger=-\gamma^i$ und $\left(\gamma^i\right)^{-1}=\left(\gamma^i\right)^\dagger$.

Bemerkung 2

Der Spinor ψ transformiert sich nicht wie ein Lorentz-Vektor. Bei Lorentz-Transformationen besitzen Spinoren folgende Eigenschaften:

- $\left(\psi^\dagger \bullet \gamma^0\right) \bullet \psi$ ist ein Lorentz-Skalar,
- $\left(\psi^\dagger \bullet \gamma^0\right) \bullet \gamma^\mu \bullet \psi$ ist ein Lorentz-Vektor,
- $\psi^\dagger \bullet \psi = \psi^\dagger \bullet 1 \bullet \psi = \psi^\dagger \bullet \left(\gamma^0\right)^2 \bullet \psi = \left(\psi^\dagger \bullet \gamma^0\right) \bullet \gamma^0 \bullet \psi$ transformiert sich wie die 0-Komponente eines 4-Vektors.

Anhang 1 Schlussfolgerungen aus $H_{\text{Dirac}}^2 = E^2$

$$c^2 \cdot \vec{p}^{\,2} + m^2 \cdot c^4 = \left(c \cdot \vec{\alpha} \bullet \vec{p} + \beta \cdot m \cdot c^2\right)^2$$

$$c^2 \cdot \vec{p}^{\,2} + m^2 \cdot c^4 = \left(c \cdot (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \bullet \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} + \beta \cdot m \cdot c^2 \right)^2 ,$$

$$c^2 \cdot \vec{p}^{\,2} + m^2 \cdot c^4 = \left(c \cdot (\alpha_1 \cdot p_1 + \alpha_2 \cdot p_2 + \alpha_3 \cdot p_3) + \beta \cdot m \cdot c^2\right)^2 ,$$

$$c^2 \cdot \vec{p}^{\,2} + m^2 \cdot c^4 = \begin{pmatrix} c^2 \cdot (\alpha_1 \cdot p_1 + \alpha_2 \cdot p_2 + \alpha_3 \cdot p_3) \bullet (\alpha_1 \cdot p_1 + \alpha_2 \cdot p_2 + \alpha_3 \cdot p_3) \\ + m \cdot c^3 \cdot (\alpha_1 \cdot p_1 + \alpha_2 \cdot p_2 + \alpha_3 \cdot p_3) \bullet \beta \\ + m \cdot c^3 \cdot \beta \bullet (\alpha_1 \cdot p_1 + \alpha_2 \cdot p_2 + \alpha_3 \cdot p_3) \\ + m^2 \cdot c^4 \cdot \beta^2 \end{pmatrix} ,$$

$$c^2 \cdot \vec{p}^{\,2} + m^2 \cdot c^4 = \begin{pmatrix} c^2 \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1 \bullet \alpha_1 \cdot p_1 \cdot p_1 + \alpha_1 \bullet \alpha_2 \cdot p_1 \cdot p_2 + \alpha_1 \bullet \alpha_3 \cdot p_1 \cdot p_3 \\ + \alpha_2 \bullet \alpha_1 \cdot p_2 \cdot p_1 + \alpha_2 \bullet \alpha_2 \cdot p_2 \cdot p_2 + \alpha_2 \bullet \alpha_3 \cdot p_2 \cdot p_3 \\ + \alpha_3 \bullet \alpha_1 \cdot p_3 \cdot p_1 + \alpha_3 \bullet \alpha_2 \cdot p_3 \cdot p_2 + \alpha_3 \bullet \alpha_3 \cdot p_3 \cdot p_3 \end{pmatrix} \\ + m \cdot c^3 \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1 \bullet \beta \cdot p_1 + \alpha_2 \bullet \beta \cdot p_2 + \alpha_3 \bullet \beta \cdot p_3 \\ + \beta \bullet \alpha_1 \cdot p_1 + \beta \bullet \alpha_2 \cdot p_2 + \beta \bullet \alpha_3 \cdot p_3 \end{pmatrix} \\ + m^2 \cdot c^4 \cdot \beta^2 \end{pmatrix} .$$

Unter Berücksichtigung, dass die Multiplikation der Impulskoordinaten kommutativ ist, wird eine Umformung vorgenommen, die zu Gleichung (7.24) der Quelle führt:

$$c^2 \cdot \vec{p}^{\,2} + m^2 \cdot c^4 = \begin{pmatrix} \frac{c^2}{2} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1 \bullet \alpha_1 \cdot p_1 \cdot p_1 + \alpha_1 \bullet \alpha_2 \cdot p_1 \cdot p_2 + \alpha_1 \bullet \alpha_3 \cdot p_1 \cdot p_3 \\ + \alpha_2 \bullet \alpha_1 \cdot p_2 \cdot p_1 + \alpha_2 \bullet \alpha_2 \cdot p_2 \cdot p_2 + \alpha_2 \bullet \alpha_3 \cdot p_2 \cdot p_3 \\ + \alpha_3 \bullet \alpha_1 \cdot p_3 \cdot p_1 + \alpha_3 \bullet \alpha_2 \cdot p_3 \cdot p_2 + \alpha_3 \bullet \alpha_3 \cdot p_3 \cdot p_3 \\ + \alpha_1 \bullet \alpha_1 \cdot p_1 \cdot p_1 + \alpha_1 \bullet \alpha_2 \cdot p_2 \cdot p_1 + \alpha_1 \bullet \alpha_3 \cdot p_3 \cdot p_1 \\ + \alpha_2 \bullet \alpha_1 \cdot p_1 \cdot p_2 + \alpha_2 \bullet \alpha_2 \cdot p_2 \cdot p_2 + \alpha_2 \bullet \alpha_3 \cdot p_3 \cdot p_2 \\ + \alpha_3 \bullet \alpha_1 \cdot p_1 \cdot p_3 + \alpha_3 \bullet \alpha_2 \cdot p_2 \cdot p_3 + \alpha_3 \bullet \alpha_3 \cdot p_3 \cdot p_3 \end{pmatrix} \\ + m \cdot c^3 \cdot \left((\alpha_1 \bullet \beta + \beta \bullet \alpha_1) \cdot p_1 + (\alpha_2 \bullet \beta + \beta \bullet \alpha_2) \cdot p_2 + (\alpha_3 \bullet \beta + \beta \bullet \alpha_3) \cdot p_3 \right) \\ + m^2 \cdot c^4 \cdot \beta^2 \end{pmatrix} ,$$

$$c^2 \cdot \vec{p}^{\,2} + m^2 \cdot c^4 = \begin{pmatrix} \frac{c^2}{2} \cdot \begin{pmatrix} (\alpha_1 \bullet \alpha_1 + \alpha_1 \bullet \alpha_1) \cdot p_1 \cdot p_1 + (\alpha_1 \bullet \alpha_2 + \alpha_2 \bullet \alpha_1) \cdot p_1 \cdot p_2 + (\alpha_1 \bullet \alpha_3 + \alpha_3 \bullet \alpha_1) \cdot p_1 \cdot p_3 \\ + (\alpha_2 \bullet \alpha_1 + \alpha_1 \bullet \alpha_2) \cdot p_2 \cdot p_1 + (\alpha_2 \bullet \alpha_2 + \alpha_2 \bullet \alpha_2) \cdot p_2 \cdot p_2 + (\alpha_2 \bullet \alpha_3 + \alpha_3 \bullet \alpha_2) \cdot p_2 \cdot p_3 \\ + (\alpha_3 \bullet \alpha_1 + \alpha_1 \bullet \alpha_3) \cdot p_3 \cdot p_1 + (\alpha_3 \bullet \alpha_2 + \alpha_2 \bullet \alpha_3) \cdot p_3 \cdot p_2 + (\alpha_3 \bullet \alpha_3 + \alpha_3 \bullet \alpha_3) \cdot p_3 \cdot p_3 \end{pmatrix} \\ + m \cdot c^3 \cdot \sum_{i=1}^{3} (\alpha_i \bullet \beta + \beta \bullet \alpha_i) \cdot p_i \\ + m^2 \cdot c^4 \cdot \beta^2 \end{pmatrix} ,$$

$$c^2 \cdot \vec{p}^{\,2} + m^2 \cdot c^4 = \frac{c^2}{2} \cdot \sum_{i,j=1}^{3} (\alpha_i \bullet \alpha_j + \alpha_j \bullet \alpha_i) \cdot p_i \cdot p_j + m \cdot c^3 \cdot \sum_{i=1}^{3} (\alpha_i \bullet \beta + \beta \bullet \alpha_i) \cdot p_i + m^2 \cdot c^4 \cdot \beta^2 .$$

Anhang 2 Nachweis, dass die Matrix β keine 2x2-Matrix ist

Wenn β eine 2x2-Matrix $\beta = \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{pmatrix}$ ist, dann „schrumpfen" die Dirac-Matrizen α_i zu den Pauli-Matrizen σ_i und die Forderung (D9) geht über in $\{\sigma_i, \beta\} = \sigma_i \bullet \beta + \beta \bullet \sigma_i = \mathbb{O}_2$. In diese Beziehung werden nacheinander die σ_i eingesetzt und es wird berücksichtigt, dass die Elemente von β reelle Zahlen sind.

Einsetzen von σ_1:

$$\mathbb{O}_2 = \sigma_1 \bullet \beta + \beta \bullet \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_{21} & \beta_{22} \\ \beta_{11} & \beta_{12} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \beta_{12} & \beta_{11} \\ \beta_{22} & \beta_{21} \end{pmatrix},$$

$$\mathbb{O}_2 = \begin{pmatrix} \beta_{12} + \beta_{21} & \beta_{11} + \beta_{22} \\ \beta_{11} + \beta_{22} & \beta_{12} + \beta_{21} \end{pmatrix} \Rightarrow \beta_{21} = -\beta_{12} \text{ und } \beta_{22} = -\beta_{11} \Rightarrow \beta = \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ -\beta_{12} & -\beta_{11} \end{pmatrix}.$$

Einsetzen von σ_2:

$$\mathbb{O}_2 = \sigma_2 \bullet \beta + \beta \bullet \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ -\beta_{12} & -\beta_{11} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ -\beta_{12} & -\beta_{11} \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{i} \cdot \beta_{12} & \mathrm{i} \cdot \beta_{11} \\ \mathrm{i} \cdot \beta_{11} & \mathrm{i} \cdot \beta_{12} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathrm{i} \cdot \beta_{12} & -\mathrm{i} \cdot \beta_{11} \\ -\mathrm{i} \cdot \beta_{11} & \mathrm{i} \cdot \beta_{12} \end{pmatrix},$$

$$\mathbb{O}_2 = 2 \cdot \mathrm{i} \cdot \begin{pmatrix} \beta_{12} & 0 \\ 0 & \beta_{12} \end{pmatrix} \Rightarrow \beta_{12} = 0 \Rightarrow \beta = \begin{pmatrix} \beta_{11} & 0 \\ 0 & -\beta_{11} \end{pmatrix}.$$

Einsetzen von σ_3:

$$\mathbb{O}_2 = \sigma_3 \bullet \beta + \beta \bullet \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} \beta_{11} & 0 \\ 0 & -\beta_{11} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \beta_{11} & 0 \\ 0 & -\beta_{11} \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_{11} & 0 \\ 0 & \beta_{11} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \beta_{11} & 0 \\ 0 & \beta_{11} \end{pmatrix},$$

$$\mathbb{O}_2 = 2 \cdot \begin{pmatrix} \beta_{11} & 0 \\ 0 & \beta_{11} \end{pmatrix} \Rightarrow \beta_{11} = 0 \Rightarrow \beta = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \mathbb{O}_2 .$$

Wäre die Matrix β eine 2x2-Matrix, dann würde es sich um die Nullmatrix handeln. Dieser Ansatz ist auszuschließen.

Anhang 3 Eigenschaften der Matrizen $\alpha_i = \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \sigma_i \\ \sigma_i & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix}$

Überprüfung von (D8), d. h. $\{\alpha_i, \alpha_j\} = \alpha_i \bullet \alpha_j + \alpha_j \bullet \alpha_i = 2 \cdot \delta_{ij} \cdot \mathbb{1}_4$

Fall 1: $i \neq j$

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = \alpha_i \bullet \alpha_j + \alpha_j \bullet \alpha_i = \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \sigma_i \\ \sigma_i & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \sigma_j \\ \sigma_j & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \sigma_j \\ \sigma_j & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \sigma_i \\ \sigma_i & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix},$$

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = \begin{pmatrix} \sigma_i \bullet \sigma_j & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & \sigma_i \bullet \sigma_j \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_j \bullet \sigma_i & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & \sigma_j \bullet \sigma_i \end{pmatrix},$$

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = \alpha_i \bullet \alpha_j + \alpha_j \bullet \alpha_i = \begin{pmatrix} \sigma_i \bullet \sigma_j + \sigma_j \bullet \sigma_i & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & \sigma_i \bullet \sigma_j + \sigma_j \bullet \sigma_i \end{pmatrix}.$$

Mit $\sigma_i \bullet \sigma_j = \mathrm{i} \cdot \varepsilon^{ijk} \cdot \sigma_k + \delta_{ij} \cdot \mathbb{1}_2$, ergibt sich für $i \neq j$ die Beziehung $\sigma_j \bullet \sigma_i = -\sigma_i \bullet \sigma_j$ und damit

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = \alpha_i \bullet \alpha_j + \alpha_j \bullet \alpha_i = \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} = \mathbb{O}_4 = 2 \cdot 0 \cdot \mathbb{1}_4 = 2 \cdot \delta_{ij} \cdot \mathbb{1}_4 .$$

Fall 2: $i = j$

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = \alpha_i \bullet \alpha_i + \alpha_i \bullet \alpha_i = \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \sigma_i \\ \sigma_i & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \sigma_i \\ \sigma_i & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \sigma_i \\ \sigma_i & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \sigma_i \\ \sigma_i & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_i^2 & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & \sigma_i^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_i^2 & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & \sigma_i^2 \end{pmatrix},$$

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = \alpha_i \bullet \alpha_i + \alpha_i \bullet \alpha_i = 2 \cdot \begin{pmatrix} \sigma_i^2 & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & \sigma_i^2 \end{pmatrix}.$$

Mit $\sigma_i \bullet \sigma_j = \mathrm{i} \cdot \varepsilon^{ijk} \cdot \sigma_k + \delta_{ij} \cdot \mathbb{1}_2$, ergibt sich für $i = j$ die Beziehung $\sigma_i^2 = \mathbb{1}_2$ und damit

$$\{\alpha_i, \alpha_i\} = \alpha_i \bullet \alpha_i + \alpha_i \bullet \alpha_i = 2 \cdot \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & \mathbb{1}_2 \end{pmatrix} = 2 \cdot 1 \cdot \mathbb{1}_4 = 2 \cdot \delta_{ii} \cdot \mathbb{1}_4 .$$

Überprüfung von (D9), d. h. $\{\alpha_i, \beta\} = \alpha_i \bullet \beta + \beta \bullet \alpha_i = \mathbb{O}_4$

$$\{\alpha_i, \beta\} = \alpha_i \bullet \beta + \beta \bullet \alpha_i = \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \sigma_i \\ \sigma_i & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \sigma_i \\ \sigma_i & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix},$$

$$\{\alpha_i, \beta\} = \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & -\sigma_i \\ \sigma_i & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \sigma_i \\ -\sigma_i & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} = \mathbb{O}_4 .$$

Anhang 4 Nachweis der Beziehung $(\vec{\sigma} \bullet \vec{u}) \bullet (\vec{\sigma} \bullet \vec{v}) = \vec{u} \bullet \vec{v} \cdot \mathbb{1}_2 + \mathrm{i} \cdot \vec{\sigma} \bullet (\vec{u} \times \vec{v})$

$$(\vec{\sigma} \bullet \vec{u}) \bullet (\vec{\sigma} \bullet \vec{v}) = (\sigma_1 \cdot u_1 + \sigma_2 \cdot u_2 + \sigma_3 \cdot u_3) \bullet (\sigma_1 \cdot v_1 + \sigma_2 \cdot v_2 + \sigma_3 \cdot v_3),$$

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \bullet \vec{u}) \bullet (\vec{\sigma} \bullet \vec{v}) = {} & u_1 \cdot v_1 \cdot \sigma_1^2 + u_1 \cdot v_2 \cdot \sigma_1 \bullet \sigma_2 + u_1 \cdot v_3 \cdot \sigma_1 \bullet \sigma_3 \\ & + u_2 \cdot v_1 \cdot \sigma_2 \bullet \sigma_1 + u_2 \cdot v_2 \cdot \sigma_2^2 + u_2 \cdot v_3 \cdot \sigma_2 \bullet \sigma_3 \\ & + u_3 \cdot v_1 \cdot \sigma_3 \bullet \sigma_1 + u_3 \cdot v_2 \cdot \sigma_3 \bullet \sigma_2 + u_3 \cdot v_3 \cdot \sigma_3^2 . \end{aligned}$$

Mit (D19), d. h. $\sigma_i \bullet \sigma_j = \mathrm{i} \cdot \varepsilon^{ijk} \cdot \sigma_k + \delta_{ij} \cdot \mathbb{1}_2$, ergibt sich daraus

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \bullet \vec{u}) \bullet (\vec{\sigma} \bullet \vec{v}) = {} & (u_1 \cdot v_1 + u_2 \cdot v_2 + u_3 \cdot v_3) \cdot \mathbb{1}_2 + \mathrm{i} \cdot u_1 \cdot v_2 \cdot \sigma_3 - \mathrm{i} \cdot u_1 \cdot v_3 \cdot \sigma_2 - \mathrm{i} \cdot u_2 \cdot v_1 \cdot \sigma_3 \\ & + \mathrm{i} \cdot u_2 \cdot v_3 \cdot \sigma_1 + \mathrm{i} \cdot u_3 \cdot v_1 \cdot \sigma_2 - \mathrm{i} \cdot u_3 \cdot v_2 \cdot \sigma_1, \end{aligned}$$

$$(\vec{\sigma} \bullet \vec{u}) \bullet (\vec{\sigma} \bullet \vec{v}) = \vec{u} \bullet \vec{v} \cdot \mathbb{1}_2 + \mathrm{i} \cdot \big(\sigma_1 \cdot (u_2 \cdot v_3 - u_3 \cdot v_2) + \sigma_2 \cdot (u_3 \cdot v_1 - u_1 \cdot v_3) + \sigma_3 \cdot (u_1 \cdot v_2 - u_2 \cdot v_1)\big),$$

$$(\vec{\sigma} \bullet \vec{u}) \bullet (\vec{\sigma} \bullet \vec{v}) = \vec{u} \bullet \vec{v} \cdot \mathbb{1}_2 + \mathrm{i} \cdot \vec{\sigma} \bullet (\vec{u} \times \vec{v}) .$$

Anhang 5 Nachweis der Beziehung $(\vec{\sigma} \bullet \vec{\pi})^2 = \vec{\pi}^2 - \frac{\hbar \cdot e}{c} \cdot \vec{\sigma} \bullet \vec{B}$

Bei der Herleitung wird beachtet, dass der

- Operator des kanonischen Impulses $\vec{\pi}$ die Pauli-Matrizen σ_i nicht beeinflusst,
- Nabla-Operator ∇ sowohl auf das Vektorpotenzial A_l als auch auf die (fiktive) Wellenfunktion ψ wirkt.

$$(\vec{\sigma} \bullet \vec{\pi})^2 = (\sigma_l \cdot \pi_l) \bullet (\sigma_m \cdot \pi_m) = \sigma_l \bullet \sigma_m \cdot \pi_l \cdot \pi_m \qquad | \ \sigma_l \bullet \sigma_m = \delta_{lm} \cdot \mathbb{1}_2 + \mathrm{i} \cdot \varepsilon^{lmn} \cdot \sigma_n ,$$

$$(\vec{\sigma} \bullet \vec{\pi})^2 = (\delta_{lm} \cdot \mathbb{1}_2 + \mathrm{i} \cdot \varepsilon^{lmn} \cdot \sigma_n) \cdot \pi_l \cdot \pi_m ,$$

$$(\vec{\sigma} \bullet \vec{\pi})^2 = \vec{\pi}^2 \cdot \mathbb{1}_2 + \mathrm{i} \cdot \varepsilon^{lmn} \cdot \sigma_n \cdot \pi_l \cdot \pi_m ,$$

$$\left(\vec{\sigma}\bullet\vec{\pi}\right)^2=\vec{\pi}^{\,2}\cdot\mathbb{1}_2+\mathrm{i}\cdot\begin{pmatrix}\varepsilon^{123}\cdot\sigma_3\cdot\pi_1\cdot\pi_2+\varepsilon^{132}\cdot\sigma_2\cdot\pi_1\cdot\pi_3+\varepsilon^{213}\cdot\sigma_3\cdot\pi_2\cdot\pi_1\\+\varepsilon^{231}\cdot\sigma_1\cdot\pi_2\cdot\pi_3+\varepsilon^{312}\cdot\sigma_2\cdot\pi_3\cdot\pi_1+\varepsilon^{321}\cdot\sigma_1\cdot\pi_3\cdot\pi_2\end{pmatrix},$$

$$\left(\vec{\sigma}\bullet\vec{\pi}\right)^2=\vec{\pi}^{\,2}\cdot\mathbb{1}_2+\begin{pmatrix}\mathrm{i}\cdot\sigma_3\cdot\pi_1\cdot\pi_2-\mathrm{i}\cdot\sigma_2\cdot\pi_1\cdot\pi_3-\mathrm{i}\cdot\sigma_3\cdot\pi_2\cdot\pi_1\\+\mathrm{i}\cdot\sigma_1\cdot\pi_2\cdot\pi_3+\mathrm{i}\cdot\sigma_2\cdot\pi_3\cdot\pi_1-\mathrm{i}\cdot\sigma_1\cdot\pi_3\cdot\pi_2\end{pmatrix},$$

$$\left(\vec{\sigma}\bullet\vec{\pi}\right)^2=\vec{\pi}^{\,2}\cdot\mathbb{1}_2+\mathrm{i}\cdot\sigma_3\cdot\left(\pi_1\cdot\pi_2-\pi_2\cdot\pi_1\right)+\mathrm{i}\cdot\sigma_2\cdot\left(\pi_3\cdot\pi_1-\pi_1\cdot\pi_3\right)+\mathrm{i}\cdot\sigma_1\cdot\left(\pi_2\cdot\pi_3-\pi_3\cdot\pi_2\right).$$

Mit (D19), d. h. $\sigma_i\bullet\sigma_j=\mathrm{i}\cdot\varepsilon^{ijk}\cdot\sigma_k+\delta_{ij}\cdot\mathbb{1}_2$, gelten
$\mathrm{i}\cdot\sigma_1=\sigma_2\bullet\sigma_3,\ \mathrm{i}\cdot\sigma_2=\sigma_3\bullet\sigma_1=-\sigma_1\bullet\sigma_3$ und $\mathrm{i}\cdot\sigma_3=\sigma_1\bullet\sigma_2$, damit ergibt sich:

$$\left(\vec{\sigma}\bullet\vec{\pi}\right)^2=\vec{\pi}^{\,2}\cdot\mathbb{1}_2+\sigma_1\bullet\sigma_2\cdot\left(\pi_1\cdot\pi_2-\pi_2\cdot\pi_1\right)-\sigma_1\bullet\sigma_3\cdot\left(\pi_3\cdot\pi_1-\pi_1\cdot\pi_3\right)+\sigma_2\bullet\sigma_3\cdot\left(\pi_2\cdot\pi_3-\pi_3\cdot\pi_2\right),$$

$$\left(\vec{\sigma}\bullet\vec{\pi}\right)^2=\vec{\pi}^{\,2}\cdot\mathbb{1}_2+\sigma_1\bullet\sigma_2\cdot\left(\pi_1\cdot\pi_2-\pi_2\cdot\pi_1\right)+\sigma_1\bullet\sigma_3\cdot\left(\pi_1\cdot\pi_3-\pi_3\cdot\pi_1\right)+\sigma_2\bullet\sigma_3\cdot\left(\pi_2\cdot\pi_3-\pi_3\cdot\pi_2\right),\qquad\text{(D45)}$$

$$\left(\vec{\sigma}\bullet\vec{\pi}\right)^2=\vec{\pi}^{\,2}\cdot\mathbb{1}_2+\sum_{l<m}\sigma_l\bullet\sigma_m\cdot\left[\pi_l,\pi_m\right].$$

Das ist das Zwischenergebnis, das in der Quelle auf S. 118 angegeben wurde. Als nächstes wird in einer Nebenrechnung der Kommutator berechnet:

$$\left[\pi_l,\pi_m\right]=\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\partial_l-\frac{e}{c}\cdot A_l\right)\cdot\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\partial_m-\frac{e}{c}\cdot A_m\right)-\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\partial_m-\frac{e}{c}\cdot A_m\right)\cdot\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\partial_l-\frac{e}{c}\cdot A_l\right),$$

$$\begin{aligned}\left[\pi_l,\pi_m\right]=&\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\partial_l\cdot\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\partial_m-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\partial_l\cdot\frac{e}{c}\cdot A_m-\frac{e}{c}\cdot A_l\cdot\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\partial_m+\frac{e}{c}\cdot A_l\cdot\frac{e}{c}\cdot A_m\\&-\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\partial_m\cdot\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\partial_l-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\partial_m\cdot\frac{e}{c}\cdot A_l-\frac{e}{c}\cdot A_m\cdot\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\partial_l+\frac{e}{c}\cdot A_m\frac{e}{c}\cdot A_l\right),\end{aligned}$$

$$\left[\pi_l,\pi_m\right]=-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{e}{c}\cdot\partial_l A_m-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{e}{c}\cdot A_l\partial_m+\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{e}{c}\cdot\partial_m A_l+\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{e}{c}\cdot A_m\partial_l,$$

$$\left[\pi_l,\pi_m\right]=\left(-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{e}{c}\cdot\partial_l A_m-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{e}{c}\cdot A_m\cdot\partial_l\right)-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{e}{c}\cdot A_l\partial_m+\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{e}{c}\cdot\partial_m A_l+\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{e}{c}\cdot A_l\cdot\partial_m\right)+\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{e}{c}\cdot A_m\partial_l,$$

$$\left[\pi_l,\pi_m\right]=-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{e}{c}\cdot\partial_l A_m+\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{e}{c}\cdot\partial_m A_l,$$

$$\left[\pi_l,\pi_m\right]=-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{e}{c}\cdot\left(\partial_l A_m-\partial_m A_l\right).\qquad\text{(D46)}$$

Weiter in der Hauptrechnung durch Einsetzen von (D46) in (D45):

$$\left(\vec{\sigma}\bullet\vec{\pi}\right)^2=\vec{\pi}^{\,2}\cdot\mathbb{1}_2+\left(-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{e}{c}\right)\cdot\left(\sigma_1\bullet\sigma_2\cdot\left(\partial_1A_2-\partial_2A_1\right)+\sigma_1\bullet\sigma_3\cdot\left(\partial_1A_3-\partial_3A_1\right)+\sigma_2\bullet\sigma_3\cdot\left(\partial_2A_3-\partial_3A_2\right)\right).\qquad\text{(D47)}$$

Das Vektorpotenzial $\vec{A}$ wird in meinem Buch auf S. 336 als Gleichung (3.71) mithilfe der magnetischen Flussdichte $\vec{B}$ eingeführt:

$$\vec{B}=\nabla\times\vec{A}=\begin{pmatrix}\partial_1\\\partial_2\\\partial_3\end{pmatrix}\times\begin{pmatrix}A_1\\A_2\\A_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\partial_2A_3-\partial_3A_2\\\partial_3A_1-\partial_1A_3\\\partial_1A_2-\partial_2A_1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}B_1\\B_2\\B_3\end{pmatrix}.\qquad\text{(D48)}$$

Substitution von (D48) in (D47) und Berücksichtigung von $\mathrm{i}\cdot\sigma_1 = \sigma_2 \bullet \sigma_3, \mathrm{i}\cdot\sigma_2 = \sigma_3 \bullet \sigma_1 = -\sigma_1 \bullet \sigma_3$ und $\mathrm{i}\cdot\sigma_3 = \sigma_1 \bullet \sigma_2$ ergibt:

$$\left(\vec{\sigma} \bullet \vec{\pi}\right)^2 = \vec{\pi}^2 \cdot 1_2 + \left(-\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \cdot \frac{e}{c}\right) \cdot \left(\underbrace{\sigma_1 \bullet \sigma_2}_{\mathrm{i}\cdot\sigma_3} \cdot B_3 + \underbrace{\sigma_1 \bullet \sigma_3}_{-\mathrm{i}\cdot\sigma_2} \cdot \left(-B_2\right) + \underbrace{\sigma_2 \bullet \sigma_3}_{\mathrm{i}\cdot\sigma_1} \cdot B_1\right),$$

$$\left(\vec{\sigma} \bullet \vec{\pi}\right)^2 = \vec{\pi}^2 \cdot 1_2 + \left(-\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \cdot \frac{e}{c}\right) \cdot \mathrm{i} \cdot \left(\sigma_1 \cdot B_1 + \sigma_2 \cdot B_2 + \sigma_3 \cdot B_3\right),$$

$$\left(\vec{\sigma} \bullet \vec{\pi}\right)^2 = \vec{\pi}^2 \cdot 1_2 - \frac{\hbar \cdot e}{c} \cdot \vec{\sigma} \bullet \vec{B}\,.$$