7. Die Dirac-Gleichung und relativistische Korrekturen

7.1 Drehimpuls

Wir betrachten die Drehgruppe in drei Dimensionen. Dazu definieren wir

$$\vec{L} = \begin{pmatrix} L^x \\ L^y \\ L^z \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad L^x = -i\hbar \begin{pmatrix} 0&0&0 \\ 0&0&1 \\ 0&-1&0 \end{pmatrix}, \; L^y = -i\hbar \begin{pmatrix} 0&0&-1 \\ 0&0&0 \\ 1&0&0 \end{pmatrix}, \; L^z = -i\hbar \begin{pmatrix} 0&1&0 \\ -1&0&0 \\ 0&0&0 \end{pmatrix}$$

oder auch $(L^i)_{jk} = \frac{\hbar}{i} \varepsilon^{ijk}$

Diese Matrizen haben die Eigenschaft

$$[L^i, L^j] = i\hbar\, \varepsilon^{ijk} L^k,$$

d.h. sie erfüllen die Drehimpulsalgebra. Eine Drehung um $|\vec{\vartheta}|$ um die Achse $\hat{\vartheta} = \frac{\vec{\vartheta}}{|\vec{\vartheta}|}$ erhalten wir mit:

$$R(\vec{\vartheta}) = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\vartheta} \cdot \vec{L}}, \qquad \vec{x} \longmapsto \vec{x}'' = R(\vec{\vartheta}) \vec{x}$$

Für $\vec{\vartheta} = (0,0,\varphi)$ überzeugen wir uns von der Gültigkeit dieser Aussage:

$$e^{\varphi \begin{pmatrix} 0&1&0 \\ -1&0&0 \\ 0&0&0 \end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} 0&0&0 \\ 0&0&0 \\ 0&0&1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1&0&0 \\ 0&1&0 \\ 0&0&0 \end{pmatrix} \cos\varphi + \sin\varphi \begin{pmatrix} 0&1&0 \\ -1&0&0 \\ 0&0&0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0&0&1 \end{pmatrix}$$

Die R sind nichts anderes als die Drehmatrizen. Sie sind orthogonal, $R^T = R^{-1}$, und es gilt $\det R = 1$. Außerdem ist $R(\vec{0}) = 1$ und sind R und R' Drehungen, so ist $R'' = R'R$ wiederum eine. Die R bilden also eine Gruppe, die sogenannte $SO(3)$ (S steht für speziell aufgrund $\det R = 1$ und O steht für orthogonal).

Wir hatten $\vec{L}$ bereits als Spinoperator für Vektorteilchen aufgefaßt. Da $\vec{L}^2 = 2\hbar^2 \mathbb{1}_3$ ist, gilt für den möglichen Eigenwert: $\hbar^2 \ell(\ell+1) = 2\hbar^2 \Longrightarrow \ell = 1$. Für den Spin in z-Richtung gilt offenbar $m = -1, 0, 1$.

Wir wollen nun den Zusammenhang dieser formalen Eigenschaften mit dem Drehimpuls begründen.
Der Bahndrehimpuls für Punktteilchen ist gegeben durch

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} \quad \Leftrightarrow \quad L^a = \varepsilon^{abc} x^b p^c$$

Es gelten die elementaren Vertauschungsrelationen

$$[L^i, x^j] = [\varepsilon^{ikl} x^k p^l, x^j] = \frac{\hbar}{i} \varepsilon^{ikj} x^k = i\hbar\, \varepsilon^{ijk} x^k$$

$$[L^i, p^j] = [\varepsilon^{ikl} x^k p^l, p^j] = i\hbar\, \varepsilon^{ijl} p^l = i\hbar\, \varepsilon^{ijk} p^k$$

$$\begin{aligned}
[L^i, L^j] &= \varepsilon^{ikl} x^k p^l \varepsilon^{jmn} x^m p^n - \varepsilon^{jmn} x^m p^n \varepsilon^{ikl} x^k p^l \\
&= i\hbar\, \varepsilon^{jmk} \varepsilon^{ikl} x^m p^l - i\hbar\, \varepsilon^{jln} \varepsilon^{ikl} x^k p^n \\
&= i\hbar (\delta^{jl} \delta^{mi} - \cancel{\delta^{ji} \delta^{ml}}) x^m p^l \\
&\quad - i\hbar (\delta^{ni} \delta^{jk} - \cancel{\delta^{nk} \delta^{ji}}) x^k p^n \\
&= i\hbar (\delta^{im} \delta^{jn} - \delta^{in} \delta^{jm}) x^m p^n = i\hbar\, \varepsilon^{ijk} L^k
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
x^m p^n x^k p^l &= x^m x^k p^n p^l - i\hbar\, \delta^{nk} x^m p^l \\
&= x^k p^l x^m p^n - i\hbar\, \delta^{nk} x^m p^l + i\hbar\, \delta^{ml} x^k p^n
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\varepsilon^{ijk} L^k &= \varepsilon^{ijk} \varepsilon^{kmn} x^m p^n = \varepsilon^{ijk} \varepsilon^{mnk} x^m p^n \\
&= (\delta^{im} \delta^{jn} - \delta^{in} \delta^{jm}) x^m p^n
\end{aligned}$$

Durch exponenzieren erhalten wir den Drehoperator für eine Drehung $|\vec{\vartheta}|$ um die Achse $\hat{\vartheta}$:

$$U(R(\vec{\vartheta})) = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\vartheta} \cdot \vec{L}} = e^{\vec{\vartheta} \cdot (\vec{x} \times \vec{\nabla})} = e^{(\vec{\vartheta} \times \vec{x}) \cdot \vec{\nabla}} \quad \text{da } \vartheta^a \varepsilon^{abc} x^b \partial^c = \varepsilon^{cab} \vartheta^a x^b \partial^c$$

Offensichtlich ist U unitär, $U^{-1}(R(\vec{\vartheta})) = U^{\dagger}(R(\vec{\vartheta}))$

Betrachten wir eine infinitesimale Drehung $\delta\vec{\vartheta}$:

$$U(R(\delta\vec{\vartheta})) \psi(\vec{x}) U^{\dagger}(R(\delta\vec{\vartheta})) \approx [1 + (\delta\vec{\vartheta} \times \vec{x}) \cdot \vec{\nabla}] \psi(\vec{x}) [1 - (\delta\vec{\vartheta} \times \vec{x}) \cdot \vec{\nabla}]$$

$$\approx \psi(\vec{x} + \delta\vec{\vartheta} \times \vec{x}) \approx \psi(R^{-1}(\delta\vec{\vartheta}) \vec{x}) \quad \text{da} \quad x'^j \approx (\delta^{jk} + \delta\vartheta^i \varepsilon^{ijk}) x^k$$

$$\vec{x}' = R(\delta\vec{\vartheta}) \vec{x} \approx \vec{x} - \delta\vec{\vartheta} \times \vec{x}$$

Durch Hintereinanderanwenden gelangen wir vom infinitesimalem $\delta\vec{\vartheta}$ zum endlichen $\vec{\vartheta}$.

Offenbar überträgt sich die Gruppeneigenschaft von R auf U: $U(R')U(R) = U(R'R)$.

Allgemein definiert man: ist G eine Gruppe mit den Elementen $g_1, g_2, \ldots$

Dann nennt man die Abbildung

$D: g \longmapsto D(g)$ eine <u>Darstellung</u> von G, sofern $D(g_2)D(g_1) = D(g_2 g_1)$ gilt.

Die Drehoperatoren U sind also eine Darstellung von $SO(3)$.

Seien nun $\vec{L}_1$ und $\vec{L}_2$ verschiedene Operatoren, welche miteinander kommutieren und Drehungen erzeugen. Dann gilt für $\vec{J} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$

$$[J^i, J^j] = i\hbar\, \varepsilon^{ijk} L_1^k + i\hbar\, \varepsilon^{ijk} L_2^k = i\hbar\, \varepsilon^{ijk} J^k,$$

d.h. $\vec{J}$ hat die Eigenschaft eines Gesamtdrehimpulses. Damit ist begründet, daß der Operator für den Photonenspin einen physikalischen Drehimpuls beschreibt und dieser in einer mit dem Bahndrehimpuls konsistenten Weise normiert ist.

Natürlich sind auch die Matrizen R im Sinne von $R \longmapsto R$ eine Darstellung von $SO(3)$. Da der Zusammenhang mit den Gruppenelementen durch die Einheits-abbildung gegeben ist, spricht man von der fundamentalen Darstellung.

Die Kommutatoren der Erzeugenden einer Lie-Gruppe nennt man Lie-Algebra, wobei die uns hier interessierenden Dreh- und Lorentzgruppen Lie-Gruppen sind. Es gilt, wenn ein Satz von Erzeugenden die Lie-Algebra erfüllt, daß diese somit auch eine Darstellung der Gruppe erzeugen.

Insbesondere finden wir die Spinordarstellung von $SO(3)$:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma} \Rightarrow [S^i, S^j] = i\hbar\varepsilon^{ijk}S^k$$

Damit ist

$$D(R(\vec{\vartheta})) = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\vartheta}\cdot\vec{S}} = e^{\frac{i}{2}\vec{\vartheta}\cdot\vec{\sigma}}$$

die gesuchte Darstellung. Mit $\vec{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\mathbb{1}_2$ gilt für die Drehimpulseigenwerte $l(l+1) = \frac{3}{4} \Rightarrow l = \frac{1}{2}$.

7.2 Lie-Algebra der Lorentz-Gruppe

Zur Beschreibung relativistischer Teilchen betrachten wir die Verallgemeinerung von $SO(3)$ auf die eigentliche Lorentzgruppe $SO^+(1,3)$. (Wir wollen Raumspiegelungen und Zeitumkehr hier ausschließen.) Wir hatten bereits bemerkt, daß $SO(3)$ eine Untergruppe von $SO^+(1,3)$ ist.

Wir wollen Darstellungen der Lorentzgruppe suchen, indem wir Operatoren identifizieren, welche deren Lie-Algebra erfüllen. Zunächst wird daher die Lie Algebra selbst benötigt.

Wir betrachten dafür

$\Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu + \omega^\mu{}_\nu$ mit infinitesimalem $\omega^\mu{}_\nu$.

Aus der Invarianzbedingung

$$g_{\varrho\sigma} = \Lambda^\mu{}_\varrho g_{\mu\nu}\Lambda^\nu{}_\sigma$$

wird so

$$g_{\varrho\sigma} = g_{\mu\nu}(\delta^\mu{}_\varrho + \omega^\mu{}_\varrho)(\delta^\nu{}_\sigma + \omega^\nu{}_\sigma)$$

$$= g_{\varrho\sigma} + \omega_{\sigma\varrho} + \omega_{\varrho\sigma} + \mathcal{O}(\omega^2),$$

so daß wir $\omega_{\sigma\varrho} = -\omega_{\varrho\sigma}$ verlangen müssen. Der antisymmetrische Tensor ω hat 6 unabhängige Einträge, welche wir mit den drei Drehungen und drei Boosts identifizieren. Der Tensor $\omega_{\varrho\sigma}$ entspricht also einer Verallgemeinerung der oben benutzten Parameter ϑ.

Für einen Darstellungsoperator in der Nähe der Einheitstransformation machen wir den Ansatz

$$D(\Lambda = \mathbb{1} + \omega) = \mathbb{1} - \frac{i}{2}\,\omega_{\varrho\sigma}\,\mathcal{J}^{\varrho\sigma} + \ldots$$

Aufgrund der Antisymmetrie von $\omega_{\varrho\sigma}$ können wir $\mathcal{J}^{\varrho\sigma} = -\mathcal{J}^{\sigma\varrho}$ verlangen. Die Wahl des Faktors $\frac{i}{2}$ ist daher günstig, letztlich aber Konvention.

Wir betrachten nun

$$D(\Lambda)\, D(\mathbb{1}+\omega)\, \underbrace{D^{-1}(\Lambda)}_{= D(\Lambda^{-1})} = D\left(\Lambda(1+\omega)\Lambda^{-1}\right)$$

$$g_{\mu\varrho}\,\Lambda^{\varrho}{}_{\sigma}\,\omega^{\sigma}{}_{\tau}\,\Lambda^{-1\,\tau}{}_{\nu}$$

$$= g_{\mu\varrho}\,\Lambda^{\varrho}{}_{\sigma}\,g^{\sigma\omega}\,\omega_{\omega\tau}\,\Lambda^{-1\,\tau}{}_{\nu}$$

$$= \Lambda_{\mu}{}^{\varrho}\,\omega_{\varrho\sigma}\,\Lambda_{\nu}{}^{\sigma}$$

Die linearen Terme sind

$$D(\Lambda)\left[\frac{1}{2}\,\omega_{\varrho\sigma}\,\mathcal{J}^{\varrho\sigma}\right] D^{-1}(\Lambda) = \frac{1}{2}\,\overbrace{(\Lambda\omega\Lambda^{-1})_{\mu\nu}}\,\mathcal{J}^{\mu\nu}$$

$\Longrightarrow$

$$D(\Lambda)\,\mathcal{J}^{\varrho\sigma}\,D^{-1}(\Lambda) = \Lambda_{\mu}{}^{\varrho}\,\Lambda_{\nu}{}^{\sigma}\,\mathcal{J}^{\mu\nu}$$

Betrachten wir nun $\Lambda^{\mu}{}_{\nu} = \delta^{\mu}{}_{\nu} + \omega^{\mu}{}_{\nu}$ selbst als infinitesimal, wobei $\omega^{\mu}{}_{\nu}$ unabhängig vom weiter oben benutzten Parameter gleichen Namens sein soll. Dann können wir diese Gleichung wiederum entwickeln und finden für die Terme zur Ordnung ω:

$$-i\left[\frac{1}{2}\,\omega_{\mu\nu}\,\mathcal{J}^{\mu\nu}, \mathcal{J}^{\varrho\sigma}\right] = \omega_{\mu}{}^{\varrho}\,\mathcal{J}^{\mu\sigma} + \omega_{\nu}{}^{\sigma}\,\mathcal{J}^{\varrho\nu}$$

$$= \omega_{\mu\nu}\,g^{\nu\varrho}\,\mathcal{J}^{\mu\sigma} - \omega_{\mu\nu}\,g^{\mu\sigma}\,\mathcal{J}^{\varrho\nu}$$

$$= \frac{\omega_{\mu\nu}}{2}\left(g^{\nu\varrho}\,\mathcal{J}^{\mu\sigma} - g^{\mu\varrho}\,\mathcal{J}^{\nu\sigma} - g^{\mu\sigma}\,\mathcal{J}^{\varrho\nu} + g^{\nu\sigma}\,\mathcal{J}^{\varrho\mu}\right)$$

Der Koeffizientenvergleich ergibt die

Lie-Algebra der Lorentz Gruppe:

$$\boxed{[J^{\mu\nu}, J^{\rho\sigma}] = i\left(g^{\nu\rho} J^{\mu\sigma} - g^{\mu\rho} J^{\nu\sigma} - g^{\sigma\mu} J^{\rho\nu} + g^{\sigma\nu} J^{\rho\mu}\right)}$$

Wir wollen uns noch die physikalische Bedeutung der Parameter $\omega_{\mu\nu}$ verschaffen. Für infinitesimales $\omega_{\mu\nu}$ gilt in der fundamentalen Darstellung der Lorentzgruppe

$$x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}{}_{\nu} x^{\nu} = (\delta^{\mu}{}_{\nu} + \omega^{\mu}{}_{\nu}) x^{\nu}$$

$$= \left(\delta^{\mu}{}_{\nu} - \frac{i}{2} \omega_{\rho\sigma}\, i[g^{\mu\rho} \delta^{\sigma}{}_{\nu} - g^{\mu\sigma} \delta^{\rho}{}_{\nu}]\right) x^{\nu}$$

$$= \left(\delta^{\mu}{}_{\nu} - \frac{i}{2} \omega_{\rho\sigma} (J^{\rho\sigma})^{\mu}{}_{\nu}\right) x^{\nu}$$

Damit ist

$$\Lambda^{\mu}{}_{\nu} = e^{-\frac{i}{2} \omega_{\rho\sigma}\, i[g^{\mu\rho} \delta^{\sigma}{}_{\nu} - g^{\mu\sigma} \delta^{\rho}{}_{\nu}]}$$

$$(J^{\rho\sigma})^{\mu}{}_{\nu} = i[g^{\mu\rho} \delta^{\sigma}{}_{\nu} - g^{\mu\sigma} \delta^{\rho}{}_{\nu}]$$

Für eine Drehung φ um die z-Achse betrachten wir

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ 0 & -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Diese wird erzeugt von

$$J^{12} = i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$\Longrightarrow$

$$\Lambda = e^{-\frac{i}{2}\omega_{12} J^{12} - \frac{i}{2}\omega_{21} J^{21}} = e^{-i\omega_{12} J^{12}} \Longrightarrow \omega_{12} = -\omega_{21} = \varphi$$

Ein Boost in z-Richtung ist gegeben durch

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & -\gamma\beta \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\gamma\beta & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh\varphi & 0 & 0 & -\sinh\varphi \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\sinh\varphi & 0 & 0 & \cosh\varphi \end{pmatrix}$$

Was wir mit Hilfe der Rapidität $\tanh\varphi = \frac{v}{c}$ ausgedrückt haben.

Der Boost wird erzeugt durch

$$J^{03} = i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = -J^{30}$$

Dann ist

$$\Lambda = e^{-i\omega_{03} J^{03}} = \begin{pmatrix} \cosh\omega_{03} & 0 & 0 & \sinh\omega_{03} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \sinh\omega_{03} & 0 & 0 & \cosh\omega_{03} \end{pmatrix} \Longrightarrow \omega_{03} = -\omega_{30} = -\varphi$$

7.3 Spinorrepräsentation und Dirac-Gleichung

Wir fassen nun die Erzeugenden für Drehungen und Boosts zusammen als:

$$\vec{J} = \begin{pmatrix} J^{23} \\ J^{31} \\ J^{12} \end{pmatrix}, \quad \vec{K} = \begin{pmatrix} J^{10} \\ J^{20} \\ J^{30} \end{pmatrix}.$$

(Wir verzichten hier der Übersichtlichkeit halber auf den Faktor $\hbar$, mit welchem $\vec{J}$ noch zu multiplizieren wäre, um den Drehimpulsoperator zu erhalten.)

Damit folgt für die Lie-Algebra die transparentere Form:

$$[J^i, J^j] = i\,\varepsilon_{ijk} J^k \qquad \text{Drehimpulsalgebra}$$
$$[J^i, K^j] = i\,\varepsilon_{ijk} K^k$$
$$[K^i, K^j] = -i\,\varepsilon_{ijk} J^k$$

Mit dem Basiswechsel

$$\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{J} + i\vec{K}), \qquad \vec{B} = \frac{1}{2}(\vec{J} - i\vec{K})$$

erhalten wir die Kommutatoren

$$[A^i, A^j] = i\varepsilon^{ijk} A^k$$
$$[B^i, B^j] = i\varepsilon^{ijk} B^k$$
$$[A^i, B^j] = 0$$

Damit zerfällt die Lie-Algebra der homogenen Lorentz-Gruppe in zwei unabhängige Drehimpulsalgebren. Diese lassen sich durch die Eigenwerte $A(A+1)$ und $B(B+1)$ der invarianten Operatoren $\vec{A}^2$ und $\vec{B}^2$ mit (B,A) charakterisieren.

Ein Zusammenhang zwischen A und B läßt sich herstellen, wenn wir Raum- und Zeitspiegelungen im Minkowski-Raum durch die unitären Matrizen

$$P = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} \text{ (Parität) und } T = \begin{pmatrix} -1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

beschreiben. Zum Beispiel sehen wir dann, daß für

$$K^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & \\ 1 & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & 0 \end{pmatrix} \text{ und } J^1 = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & 0 & & \\ & & 0 & -1 \\ & & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$P K^1 P = -K$ und $P J^1 P = J^1$ sind. Damit folgen $P\vec{A}P = \vec{B}$ und $P\vec{B}P = \vec{A}$. Die Darstellungen (B,A) und (A,B) gehen auseinander durch eine Raumspiegelung hervor.

Die triviale Darstellung ist offensichtlich durch $(0,0)$ gegeben.

Betrachten wir nun die Spinordarstellungen $(\frac{1}{2}, 0)$ und $(0, \frac{1}{2})$. Mit

$$\vec{A} = \frac{\vec{\sigma}}{2}, \quad \vec{B} = 0$$

erfüllen wir die Kommutatorbeziehungen.

Beachte, daß unsere Wahl entspricht:

$$J^{i0} = K^i = -i\,(\vec{A}-\vec{B}) = -\frac{i}{2}\vec{\sigma}$$

$$J^{ij} = \varepsilon^{ijk} J^k = \varepsilon^{ijk}(A^k+B^k) = \frac{1}{2}\varepsilon^{ijk}\sigma^k$$

Dies motiviert die Definitionen

$$\sigma^\mu = (\mathbb{1}, \sigma^i), \quad \bar{\sigma}^\mu = (\mathbb{1}, -\sigma^i)$$

$$\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{4}(\sigma^\mu\bar{\sigma}^\nu - \sigma^\nu\bar{\sigma}^\mu)$$

$$\bar{\sigma}^{\mu\nu} = \frac{i}{4}(\bar{\sigma}^\mu\sigma^\nu - \bar{\sigma}^\nu\sigma^\mu)$$

Damit ist $J^{\mu\nu} = \bar{\sigma}^{\mu\nu}$ und die Darstellungsmatrizen haben die Form

$$D_{(0,\frac{1}{2})}(\Lambda) = e^{-\frac{i}{2}\omega_{\mu\nu}\bar{\sigma}^{\mu\nu}}$$

$(0,\frac{1}{2})$ $[(\frac{1}{2},0)]$ wirkt auf zweidimensionale Objekte, die rechtshändige [linkshändige] Spinoren genannt werden.

Für die $(\frac{1}{2},0)$ Darstellung wählt man $\vec{A}=0$, $\vec{B}=\frac{\vec{\sigma}}{2}$, so daß

$$J^{i0} = i\frac{\sigma^i}{2}$$

$$J^{ij} = \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\sigma^k \qquad \Rightarrow \quad J^{\mu\nu} = \sigma^{\mu\nu}$$

Die Darstellungen haben hier also die Gestalt

$$D_{(\frac{1}{2},0)}(\Lambda) = e^{-\frac{i}{2}\omega_{\mu\nu}\sigma^{\mu\nu}}$$

Die Darstellungen $(\frac{1}{2},0)$ und $(0,\frac{1}{2})$ sind nicht äquivalent, d.h. es gibt keine Matrix S mit

$$D_{(0,\frac{1}{2})}(\Lambda) = S\,D_{(\frac{1}{2},0)}(\Lambda)\,S^{-1} \;\forall\,\Lambda$$

Unser Ziel ist die Beschreibung der elektromagnetischen Wechselwirkungen des Elektrons. Diese sind invariant unter Raumspiegelungen, so daß wir die beiden Darstellungen noch in geeigneter Weise kombinieren und symmetrisieren müssen. Wir bemerken allerdings, daß die schwache

Wechselwirkung nur an linkshändige Spinoren koppelt, so daß diese Unterscheidung in der Tat in der Natur verwirklicht ist.

Die gewünschte paritätsinvariante Darstellung für elektromagnetische Wechselwirkungen konstruieren wir als direkte Summe $(\frac{1}{2},0)\oplus(0,\frac{1}{2})$:

$$\Lambda \longmapsto \begin{pmatrix} D_{(\frac{1}{2},0)}(\Lambda) & 0 \\ 0 & D_{(0,\frac{1}{2})}(\Lambda) \end{pmatrix}$$

Eine Darstellung, deren Matrizen sich durch eine Ähnlichkeitstransformation nicht auf blockdiagonale Form bringen läßt, heißt **irreduzibel**. Offensichtlich ist $(\frac{1}{2},0)\oplus(0,\frac{1}{2})$ reduzibel. Verallgemeinern wir die Lorentzgruppe jedoch in so einer Weise, daß Paritätstransformationen durch die Matrix

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^0 \\ \sigma^0 & 0 \end{pmatrix}$$

hinzugefügt werden, so ist die neue Darstellung irreduzibel. Wir nennen $(\frac{1}{2},0)\oplus(0,\frac{1}{2})$ die Dirac-Darstellung der Lorentz-Gruppe und die zugehörigen vierkomponentigen Spinoren **Dirac-Spinoren**.

Wir definieren die Dirac-Matrizen in der chiralen (oder auch Weyl-) Darstellung:

$$\gamma^\mu = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^\mu \\ \bar{\sigma}^\mu & 0 \end{pmatrix}$$

mittels derer wir die Erzeugenden folgendermaßen ausdrücken können:

$$\Sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{4}[\gamma^\mu, \gamma^\nu] = \begin{pmatrix} \sigma^{\mu\nu} & 0 \\ 0 & \bar{\sigma}^{\mu\nu} \end{pmatrix}$$

Die Darstellungsmatrizen haben damit die Form

$$D_{(\frac{1}{2},0)\oplus(0,\frac{1}{2})}(\Lambda) = e^{-\frac{i}{2}\omega_{\mu\nu}\Sigma^{\mu\nu}}$$

In der Weyl-Darstellung haben die Dirac-Spinoren eine einfache Zerlegung in einen links- und einen rechtshändigen Teil:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_R \end{pmatrix}$$

Die γ^μ bilden eine Clifford-Algebra, d.h. sie genügen den Antivertauschungsrelationen

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2\mathbb{1}g^{\mu\nu}$$

Mit Hilfe der Clifford-Algebra läßt sich allgemein zeigen, daß $\Sigma^{\mu\nu}$ die Lorentzalgebra erfüllt, was eine Abkürzung gegenüber der hier vorgestellten konstruktiven Methode darstellt.
Die Eigenschaften der Darstellung werden durch die Transformationen $\gamma^\mu \longmapsto S\gamma^\mu S^{-1}$ nicht verändert. Daher benutzt man auch häufig die äquivalente Dirac-Darstellung:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}$$

Wir wollen nun noch eine Lorentz-kovariante Feldgleichung für Spin-$\frac{1}{2}$ Fermionen aufstellen. Dazu zeigen wir noch, daß, wie die Indexschreibweise bereits suggeriert, γ^μ ein Lorentzvektor ist. Dazu berechnen wir

$$[\gamma^\mu, \Sigma^{\rho\sigma}] = \frac{i}{4}[\gamma^\mu, [\gamma^\rho, \gamma^\sigma]]$$

$$= \frac{i}{4}\left[\gamma^\mu\gamma^\rho\gamma^\sigma - \gamma^\mu\gamma^\sigma\gamma^\rho - \gamma^\rho\gamma^\sigma\gamma^\mu + \gamma^\sigma\gamma^\rho\gamma^\mu\right]$$
$$= \frac{i}{4}\left[4g^{\rho\sigma}\gamma^\mu - 2\gamma^\mu\gamma^\sigma\gamma^\rho - 2\gamma^\rho\gamma^\sigma\gamma^\mu\right]$$
$$= \frac{i}{4}\left[2\gamma^\mu\gamma^\rho\gamma^\sigma - 2\gamma^\rho\gamma^\sigma\gamma^\mu\right]$$

$$= \frac{i}{4}\left[4g^{\mu\rho}\gamma^\sigma - 2\gamma^\rho\gamma^\mu\gamma^\sigma - 2\gamma^\rho\gamma^\sigma\gamma^\mu\right]$$
$$= \frac{i}{4}\left[4g^{\mu\rho}\gamma^\sigma - 4g^{\mu\sigma}\gamma^\rho\right] = (\mathcal{J}^{\rho\sigma})^\mu{}_\nu\gamma^\nu$$

benutze $\gamma^\mu\gamma^\nu = 2g^{\mu\nu} - \gamma^\nu\gamma^\mu$ und $(\mathcal{J}^{\rho\sigma})^\mu{}_\nu = i\left[g^{\mu\rho}\delta^\sigma{}_\nu - g^{\mu\sigma}\delta^\rho{}_\nu\right]$

Damit folgt

$$\left(\mathbb{1} + \frac{i}{2}\omega_{\rho\sigma}\Sigma^{\rho\sigma}\right)\gamma^\mu\left(\mathbb{1} - \frac{i}{2}\omega_{\rho\sigma}\Sigma^{\rho\sigma}\right) = \left(1 - \frac{i}{2}\omega_{\rho\sigma}(\mathcal{J}^{\rho\sigma})^\mu{}_\nu\right)\gamma^\nu$$

welches die infinitesimale Form ist von

$$D^{-1}(\Lambda)\gamma^\mu D(\Lambda) = \Lambda^\mu{}_\nu\gamma^\nu$$

Die Wirkung einer Lorentztransformation auf die Ableitung eines Skalarfeldes ist

$$\partial_\mu\phi(x) \longrightarrow \partial_\mu\phi(\Lambda^{-1\rho}{}_\sigma x^\sigma) = \left[\Lambda^{-1\nu}{}_\mu\partial_\nu\phi\right](\Lambda^{-1}x) = \left[\Lambda_\mu{}^\nu\partial_\nu\phi\right](\Lambda^{-1}x)$$

Entsprechend ist für einen Spinor

$$\partial_\mu\psi(x) \to \partial_\mu D(\Lambda)\psi(\Lambda^{-1}x) = \left[\Lambda_\mu{}^\nu\partial_\nu D(\Lambda)\psi\right](\Lambda^{-1}x)$$

$$\begin{aligned}
i\gamma^\mu\partial_\mu\psi \to\ & i\gamma^\mu\Lambda^{-1\nu}{}_\mu\partial_\nu D(\Lambda)\psi \\
&= D(\Lambda)D^{-1}(\Lambda)\,i\gamma^\mu\Lambda^{-1\nu}{}_\mu\partial_\nu D(\Lambda)\psi \\
&= D(\Lambda)\Lambda^\mu{}_\rho\, i\gamma^\rho\Lambda^{-1\nu}{}_\mu\partial_\nu\psi \\
&= D(\Lambda)\,i\gamma^\rho\delta^\nu{}_\rho\partial_\nu\psi \\
&= D(\Lambda)\,i\gamma^\mu\partial_\mu\psi
\end{aligned}$$

Der Term $\gamma^\mu\partial_\mu$ transformiert also selbst wie ein Dirac-Spinor. Wir erhalten die berühmte

$$\boxed{\begin{array}{c}\text{Dirac-Gleichung}\\ \left(i\gamma^\mu\partial_\mu - \frac{mc}{\hbar}\right)\psi = 0\end{array}}$$

Insgesamt transformiert die linke Seite wie ein Dirac-Spinor, so daß die Gleichung Lorentz-kovariant ist.
Zur Begründung der Vorfaktoren der einzelnen Terme bemerken wir, daß

$$\left(-i\gamma^\nu\partial_\nu - \frac{mc}{\hbar}\right)\left(i\gamma^\mu\partial_\mu - \frac{mc}{\hbar}\right) = \gamma^\nu\gamma^\mu\partial_\nu\partial_\mu + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}$$

$$= \frac{1}{2}\{\gamma^\mu,\gamma^\nu\}\partial_\mu\partial_\nu + \frac{m^2c^2}{\hbar^2} = \partial^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}$$

Ist ψ eine Lösung der Dirac-Gleichung, dann löst es automatisch auch die Klein-Gordon Gleichung und erfüllt die Energieimpulsbeziehung für die Masse m. Es ist also

$$\psi(x) \propto e^{-\frac{i}{\hbar}p\cdot x} \quad \text{mit} \quad p^0 = \pm\sqrt{\vec{p}^{\,2} + m^2c^2}$$

Die freie Dirac-Gleichung im Impulsraum läßt sich also schreiben als

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)\psi = 0$$

Wir führen an dieser Stelle auch den sogenannten Feynman-Slash ein: $\not{V} = \gamma^\mu V_\mu = \gamma_\mu V^\mu$. Damit können wir etwas abgekürzt schreiben:

$$\left(i\not{\partial} - \frac{mc}{\hbar}\right)\psi = 0 \quad \text{und} \quad (\not{p} - mc)\psi = 0$$

Multiplikation der Dirac-Gleichung mit γ^0 gibt

$$\left(\mathbb{1}_4 p^0 - \gamma^0\vec{\gamma}\cdot\vec{p} - \gamma^0 mc\right)\psi = 0$$

Wir identifizieren so

$$E \equiv cp^0 \equiv H = c\gamma^0\vec{\gamma}\cdot\vec{p} + \gamma^0 mc^2 = c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta mc^2 \text{ mit } \vec{\alpha} = \gamma^0\vec{\gamma},\ \beta = \gamma^0$$

Der Hamiltonoperator H läßt sich auch in rigoroser Weise aus dem kanonischen Formalismus herleiten und stimmt dann mit dem hier präsentierten Resultat überein.

Wir betrachten nun ein Teilchen mit Impuls $\vec{p} = p\hat{z}$. Wir benutzen nun die sogenannte Dirac-Darstellung der γ-Matrizen, in welcher

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \text{ und } \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \quad (2\times 2 \text{ Blöcke})$$

Dann lautet die Eigenwertgleichung $H\psi = E\psi$ in ihren Komponenten:

$$\begin{pmatrix} mc & 0 & p & 0 \\ 0 & mc & 0 & -p \\ p & 0 & -mc & 0 \\ 0 & -p & 0 & -mc \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = \frac{E}{c} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}$$

Für $E = c\sqrt{\vec{p}^2 + m^2c^2}$ erhalten wir

$$u_R^{(+)}(p) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp}{E+mc^2} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad u_L^{(+)}(p) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{-cp}{E+mc^2} \end{pmatrix}$$

und für $E = -c\sqrt{\vec{p}^2 + m^2c^2}$

$$u_R^{(-)}(p) = \begin{pmatrix} \frac{-cp}{-E+mc^2} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad u_L^{(-)}(p) = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{cp}{-E+mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Im nichtrelativistischen Grenzfall $p \ll mc$ haben diese Lösungen also jeweils eine große und eine kleine Komponente. Dies

ist eine spezielle Eigenschaft der Dirac-Darstellung, welche sie zur bevorzugten Darstellung in diesem Limes macht.
Die Erzeugenden der Drehungen sind gegeben durch

$$\vec{J} = \begin{pmatrix} \Sigma^{23} \\ \Sigma^{31} \\ \Sigma^{12} \end{pmatrix} \quad \text{oder} \quad J^i = \frac{1}{2}\varepsilon^{ijk}\Sigma^{jk} = \frac{i}{8}\varepsilon^{ijk}[\gamma^j, \gamma^k]$$

In der Dirac-Darstellung ist

$$\gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix},$$

so daß

$$J^i = -\frac{i}{8}\varepsilon^{ijk}\begin{pmatrix} [\sigma^j, \sigma^k] & 0 \\ 0 & [\sigma^j, \sigma^k] \end{pmatrix} = -\frac{i}{8}\underbrace{\varepsilon^{ijk}\varepsilon^{jkl}}_{=2\delta^{il}} 2i \begin{pmatrix} \sigma^l & 0 \\ 0 & \sigma^l \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & \sigma^i \end{pmatrix}$$

Der Spinoperator ist also

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}$$

und wir definieren die Helizität $h = \hat{p}\cdot\vec{S}$. Teilchen mit $h<0$ $(h>0)$ heißen linkshändig (rechtshändig). Obige Lösungen mit Subskript L (R) haben somit $h = -\frac{\hbar}{2}$ $(h = +\frac{\hbar}{2})$.

Die Ankopplung ans Elektromagnetische Feld geschieht am besten im Lagrangeformalismus, indem man eine sowohl Lorentz- als auch Eichinvariante Wirkung konstruiert.
Wir geben das Resultat an:

$$\left(i\not{\partial} - \frac{e}{\hbar c}\not{A} - \frac{mc}{\hbar}\right)\psi = 0$$

wobei die Ladung e des Elektrons negativ ist.
Wir beachten die Form von γ^0 in der Dirac-Darstellung.

Dann klärt sich auch die Bedeutung des Vorzeichens von E: Lösungen mit positiver Energie entsprechen per Konvention Teilchen, mit negativer Energie Antiteilchen. Die Entdeckung des Positrons ist daher ein wesentlicher Nachweis der Gültigkeit der relativistischen Quantenfeldtheorie und der Dirac-Gleichung.

7.5 Dirac-Gleichung im Zentralpotential

Wir setzen nun $eA^0(\vec{x}) = V(\vec{x})$, welches dem elektrostatischen Potential eines Atomkerns entsprechen soll, und außerdem, wie in der Quantenfeldtheorie üblich, $\hbar = c = 1$. Weiterhin ist $\vec{A}(\vec{x}) = 0$. Gesucht sind dann Lösungen der Eigenwertgleichung

$$(i\partial_t + i\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla} - V(\vec{x}) - \beta m)\psi = 0 \Longleftrightarrow i\partial_t\psi = H\psi = E\psi$$

mit

$$H = \vec{\alpha}\cdot\frac{\vec{\nabla}}{i} + \beta m + V(\vec{x}) = \vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m + V(\vec{x})$$

Im nichtrelativistischen Fall fußt die Lösungsstrategie darauf, daß $\vec{L} = \vec{x}\times\vec{p}$ mit H kommutiert. Dies ist zunächst klar für β und für $V(|\vec{x}|)$ (da $[\vec{L}, \vec{x}^2] = 0$).

Allerdings finden wir

$$[\vec{\alpha}\cdot\vec{p}, L^i] = [\alpha^l p^l, \varepsilon^{ijk} x^j p^k] = \varepsilon^{ijk}\alpha^l [p^l, x^j p^k]$$

$$\underset{\uparrow}{=} -i\varepsilon^{ijk}\alpha^j p^k \neq 0$$

$$p^l x^j p^k - x^j p^k p^l = -i\delta^{jl}p^k$$

Der Bahndrehimpuls ist also keine Erhaltungsgröße mehr im Zentralpotential. Nun zum Spin. Zunächst sieht man, daß $[\beta, \vec{S}] = 0$. Desweiteren ist

$$[\alpha^i, S^j] = \left[\begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sigma^j & 0 \\ 0 & \sigma^j \end{pmatrix}\right] = i\,\varepsilon^{ijk}\alpha^k$$

womit folgt

$$[\vec{\alpha}\cdot\vec{p}, S^j] = [\alpha^i, S^j]\,p^i = i\,\varepsilon^{ijk}\alpha^k p^i$$

Der Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ ist also weiterhin erhalten im Sinne von $[H, \vec{J}] = 0$.

Zur Lösung der Eigenwertgleichung zerlegen wir den Dirac-Spinor in zwei zweikomponentige Beiträge

$$\psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}) \\ \psi_2(\vec{x}) \end{pmatrix}$$

In der Weyl-Darstellung sehen wir unmittelbar, daß

$$\gamma^0 \psi(-\vec{x}) = \beta\,\psi(-\vec{x}) = \pm\,\psi(\vec{x}),$$

da eine Raumspiegelung links- und rechtshändige Komponenten vertauscht und zweimalige Spiegelung wieder zum ursprünglichen Spinor führen muß, d.h. es sind nur die Phasen ± 1 möglich. Diese Eigenschaft bleibt auch unter Ähnlichkeitstransformationen erhalten, d.h. sie ist auch in der Dirac-Darstellung gültig, was explizit bedeutet

$$\begin{pmatrix} \psi_1(-\vec{x}) \\ -\psi_2(-\vec{x}) \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}) \\ \psi_2(\vec{x}) \end{pmatrix}$$

Sei nun m die Magnetquantenzahl für den Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. Dann gilt (ohne Beweis) die Clebsch-Gordan Entwicklung (alle Zustände unten sind Eigenzustände von $\vec{L}^2, \vec{S}^2$)

$$|\underbrace{l+\tfrac{1}{2}}_{j}, \underbrace{m}_{j_z}\rangle = \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\,|m-\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\,|\underbrace{m+\tfrac{1}{2}}_{l_z}, \underbrace{-\tfrac{1}{2}}_{s_z}\rangle$$

$$|l-\tfrac{1}{2}, m\rangle = -\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\,|m-\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\,|m+\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle$$

Wir definieren die Spin-Kugelflächenfunktionen

$$\mathcal{Y}_l^{j=l\pm\frac{1}{2},m} = \sqrt{\frac{1}{2l+1}} \begin{pmatrix} \pm\sqrt{l\pm m+\frac{1}{2}}\; Y_l^{m-\frac{1}{2}}(\vartheta,\varphi) \\ \sqrt{l\mp m+\frac{1}{2}}\; Y_l^{m+\frac{1}{2}}(\vartheta,\varphi) \end{pmatrix}$$

Per Konstruktion sind diese Eigenfunktionen von $\vec{J}^2$, $J_z = m$, $\vec{L}^2$ und $\vec{S}^2$. Die Paritätsinvarianz bedeutet, daß genau eine von beiden Komponenten $\psi_{1,2}$ gerade bezw. ungerade sein muß. Da der Bahndrehimpuls $j\pm\frac{1}{2}$ die Parität bestimmt, folgen die Lösungsansätze $(r=|\vec{x}|)$

$$\psi(\vec{x})=\psi_A(\vec{x})=\begin{pmatrix} u_A(r)\,\mathcal{Y}^{j,m}_{j-\frac{1}{2}}(\vartheta,\varphi) \\ -i v_A(r)\,\mathcal{Y}^{j,m}_{j+\frac{1}{2}}(\vartheta,\varphi)\end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \psi(\vec{x})=\psi_B(\vec{x})=\begin{pmatrix} u_B(r)\,\mathcal{Y}^{j,m}_{j+\frac{1}{2}}(\vartheta,\varphi) \\ -i v_B(r)\,\mathcal{Y}^{j,m}_{j-\frac{1}{2}}(\vartheta,\varphi)\end{pmatrix}$$

Wir sehen nun explizit die Mischung von Beiträgen mit verschiedenem $\vec{L}$, $\vec{L}^2$ und $\vec{S}$, wie oben bereits erwartet. Gesucht sind nun Differentialgleichungen für die Radialfunktionen $u_{A,B}(r)$ und $v_{A,B}(r)$. Dazu zerlegen wir

$[E-\vec{\alpha}\cdot\vec{p}-\beta m - V(r)]\,\psi=0$ in Diagonalblöcke:

$$[E-m-V(r)]\,\psi_1 - \vec{p}\cdot\vec{\sigma}\,\psi_2 = 0$$
$$[E+m-V(r)]\,\psi_2 - \vec{p}\cdot\vec{\sigma}\,\psi_1 = 0$$

Wir benutzen nun

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}\cdot\vec{b}) = \vec{a}\cdot\vec{b} + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{a}\times\vec{b})$$

was wir folgendermaßen zeigen:

$$\sigma^j a^j \sigma^k b^k = \frac{1}{2}\left(\{\sigma^j,\sigma^k\}+[\sigma^j,\sigma^k]\right) a^j b^k = (\delta^{jk}+i\sigma^i\varepsilon^{ijk})\,a^j b^k$$

Es folgt daraus auch, daß $(\vec{\sigma}\cdot\vec{a})^2=\vec{a}^2$ und

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{p} = \frac{1}{r^2}(\vec{\sigma}\cdot\vec{x})(\vec{\sigma}\cdot\vec{x})(\vec{\sigma}\cdot\vec{p}) = \frac{1}{r^2}(\vec{\sigma}\cdot\vec{x})[\vec{x}\cdot\vec{p}+i\vec{\sigma}\cdot(\vec{x}\times\vec{p})]$$
$$= \vec{\sigma}\cdot\hat{r}\left[\hat{r}\cdot\vec{p}+i\vec{\sigma}\cdot\frac{\vec{L}}{|\vec{r}|}\right]$$

Desweiteren schreiben wir

$$\hat{r}\cdot\vec{p} = -i\frac{\partial}{\partial r} \quad \text{und} \quad \vec{\sigma}\cdot\vec{L} = 2\vec{S}\cdot\vec{L} = \vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2.$$

Damit ist

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{L})\, \mathcal{Y}_l^{jm} = \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right] \mathcal{Y}_l^{jm} =: \varkappa(j,l)\, \mathcal{Y}_l^{jm}$$

mit $$\varkappa = \begin{cases} -j - \frac{3}{2} = -(\lambda+1) & \text{for } l = j+\frac{1}{2} \\ j - \frac{1}{2} = +(\lambda-1) & \text{for } l = j-\frac{1}{2} \end{cases} \quad \text{und} \quad \lambda = j+\frac{1}{2}$$

Nun zu

$$\vec{\sigma}\cdot\hat{r} = \sin\vartheta(\cos\varphi\,\sigma^1 + \sin\varphi\,\sigma^2) + \cos\vartheta\,\sigma^3 = \begin{pmatrix} \cos\vartheta & e^{-i\varphi}\sin\vartheta \\ e^{i\varphi}\sin\vartheta & -\cos\vartheta \end{pmatrix}$$

Dies ist ein Pseudoskalar, d.h. der Effekt dieses Operators auf die Lösung ψ darf nicht von der Wahl von $\hat{r}$ abhängen. Wir wählen also $\hat{r} = \hat{z}$ und damit $\vartheta = 0$.

Aus der Definition der Kugelflächenfunktionen lesen wir ab, daß

$$Y_l^m(\vartheta=0,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,\delta_{m0} \quad \text{und damit}$$

$$\mathcal{Y}_l^{j=l\pm\frac{1}{2},m}(\vartheta=0,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} \pm\sqrt{l\pm m+\frac{1}{2}}\;\delta_{m,\frac{1}{2}} \\ \sqrt{l\mp m+\frac{1}{2}}\;\delta_{m,-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

oder auch

$$\mathcal{Y}_{l=j\mp\frac{1}{2}}^{j,m}(\vartheta=0,\varphi) = \sqrt{\frac{j+\frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} \pm\delta_{m,\frac{1}{2}} \\ \delta_{m,-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

Also ist

$$(\vec{\sigma}\cdot\hat{z})\,\mathcal{Y}_{l=j\mp\frac{1}{2}}^{j,m}(\vartheta=0,\varphi) = -\sqrt{\frac{j+\frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} \mp\delta_{m,\frac{1}{2}} \\ \delta_{m,-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = -\mathcal{Y}_{l=j\pm\frac{1}{2}}^{j,m}(\vartheta=0,\varphi)$$

und letztlich gilt wegen der Rotationsinvarianz

$$(\vec{\sigma}\cdot\hat{r})\,\mathcal{Y}_{l=j\mp\frac{1}{2}}^{j,m}(\vartheta,\varphi) = -\mathcal{Y}_{l=j\pm\frac{1}{2}}^{j,m}(\vartheta,\varphi)$$

Für gegebenes j, m, l ändert der Operator $\vec{\sigma}\cdot\hat{r}$ den

Bahndrehimpuls auf den anderen erlaubten Wert, welcher entgegengesetzte Parität hat. Insgesamt ist

$$\vec{p}\cdot\vec{\sigma}\,\mathcal{Y}^{jm}_{l=j\mp\frac{1}{2}} = \vec{\sigma}\cdot\hat{r}\left(\hat{r}\cdot\vec{p} + i\vec{\sigma}\cdot\frac{\vec{L}}{r}\right)\mathcal{Y}^{jm}_{l=j\mp\frac{1}{2}} = \left(i\frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{r}\varkappa\right)\mathcal{Y}^{jm}_{l=j\pm\frac{1}{2}}$$

Wir können diese Resultate nun in die gekoppelten Differential=gleichungen für $\psi_{1,2}$ einsetzen. Gemäß der Möglichkeiten A und B ist nun

$$[E-m-V(r)]\,u_A(r) - \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\lambda+1}{r}\right)v_A(r) = 0$$
$$[E+m-V(r)]\,v_A(r) + \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\lambda-1}{r}\right)u_A(r) = 0$$

$$[E-m-V(r)]\,u_B(r) - \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\lambda-1}{r}\right)v_B(r) = 0$$
$$[E+m-V(r)]\,v_B(r) + \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\lambda+1}{r}\right)u_B(r) = 0$$

Die Gleichungen B folgen aus A mit der Ersetzung $\lambda \to -\lambda$, so daß wir zunächst allein den Fall A untersuchen und den Subskript fallenlassen.
Für Einelektronenatome sind diese Radialgleichungen analytisch lösbar. Das Potential ist dabei gegeben durch $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ mit der Kernladungszahl Z. Wir definieren noch $\varepsilon = \frac{E}{m}$ und $x = mr$ und benutzen außerdem $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$.
Wir erhalten

$$\left[\varepsilon - 1 + \frac{Z\alpha}{x}\right]u(x) - \left[\frac{d}{dx} + \frac{\lambda+1}{x}\right]v(x) = 0$$

$$\left[\varepsilon + 1 + \frac{Z\alpha}{x}\right]v(x) + \left[\frac{d}{dx} - \frac{\lambda-1}{x}\right]u(x) = 0$$

Für $x \longrightarrow \infty$ wird aus der ersten Gleichung

$$(\varepsilon - 1)\,u - \frac{dv}{dx} = 0$$

was eingesetzt in die zweite ergibt:

$$(\varepsilon+1)v + \frac{1}{\varepsilon-1}\frac{d^2 v}{dx^2} = 0 \iff \frac{d^2 v}{dx^2} = (1-\varepsilon^2)v$$

Für einen gebundenen Zustand ist die kinetische Energie $E-m-V(r)=0$ für ein $r>0$. Außerdem ist $V(r)<0$, so daß wir $m>E$ und damit $\varepsilon<1$ annehmen dürfen. Die asymptotischen Lösungen sind also

$$v(x) = e^{-\sqrt{1-\varepsilon^2}\,x} \quad \text{und} \quad u = e^{-\sqrt{1-\varepsilon^2}\,x} \quad \text{für } x\to\infty$$

wobei wir zunächst die Normierung (auch die relative) ignorieren. Ähnlich wie für den nichtrelativistischen Fall legt dies den folgenden Reihenansatz nahe:

$$u(x) = e^{-\sqrt{1-\varepsilon^2}\,x}\, x^{\gamma} \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i \qquad v(x) = e^{-\sqrt{1-\varepsilon^2}\,x}\, x^{\gamma} \sum_{i=0}^{\infty} b_i x^i$$

(Ableitungen, welche nicht auf die Exponentialfunktionen wirken, liefern nachführende Terme, so daß diese Ansätze asymptotischen Lösungen entsprechen). Setzen wir dies in die obigen gekoppelten Differentialgleichungen ein, dann erhalten wir zur Ordnung $x^{\gamma-1}$

$$Z\alpha a_0 - [\gamma+\lambda+1] b_0 = 0$$
$$[\gamma-\lambda+1] a_0 + Z\alpha b_0 = 0$$

Wir wollen die exakte Lösung rekursiv konstruieren. Damit die führenden Koeffizienten nicht verschwinden, muß die dem Gleichungssystem zugeordnete Determinante verschwinden:

$$(Z\alpha)^2 + (\gamma+1)^2 - \lambda^2 = 0 \iff \gamma = -1 \pm \sqrt{\lambda^2 - (Z\alpha)^2}$$

Da $\lambda = j + \frac{1}{2} = O(1)$ ist, bricht die Entwicklung für $Z \gg 137$ zusammen. Um keine nichtintegrable Singularität zu erzeugen, wählen wir das positive Vorzeichen, d.h.

$$\gamma = -1 + \sqrt{(j+\tfrac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2}$$

Der Koeffizient a_0 wird durch Normierung festgelegt, so daß

$$b_0 = \frac{a_0 Z\alpha}{\gamma + \lambda + 1}$$

Für Terme zur Ordnung $\gamma + i - 1$ erhalten wir

$$(1-\varepsilon) a_{i-1} - Z\alpha\, a_i - \sqrt{1-\varepsilon^2}\, b_{i-1} + (\lambda + 1 + \gamma + i) b_i = 0$$

$$(1+\varepsilon) b_{i-1} + Z\alpha\, b_i - \sqrt{1-\varepsilon^2}\, a_{i-1} - (\lambda - 1 - \gamma - i) a_i = 0$$

Wir multiplizieren die erste Gleichung mit $\sqrt{1+\varepsilon}$, die zweite mit $\sqrt{1-\varepsilon}$ und addieren beide. Wir erhalten so die Beziehung

$$\frac{b_i}{a_i} = \frac{\sqrt{1+\varepsilon}\, Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon}\,(\lambda - 1 - \gamma - i)}{\sqrt{1-\varepsilon}\, Z\alpha + \sqrt{1+\varepsilon}\,(\lambda + 1 + \gamma + i)}$$

$bB + aA = 0 \iff \frac{b}{a} = \frac{A}{B}$

Für große Werte von x dominieren große i und

$$\frac{b_i}{a_i} \simeq -\sqrt{\frac{1+\varepsilon}{1-\varepsilon}} \quad (i \gg 1)$$

Ebenso ist dann $\frac{a_i}{a_{i-1}} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{i}\right)$ $(i \gg 1)$. Die Reihenansätze konvergieren also nicht, es sei denn $a_i = b_i = 0$ für ein $i = n' + 1$. In so einem Fall sind

$$(1-\varepsilon) a_{n'} - \sqrt{1-\varepsilon^2}\, b_{n'} = 0$$

$$(1+\varepsilon) b_{n'} - \sqrt{1-\varepsilon^2}\, a_{n'} = 0$$

Beide Gleichungen sind äquivalent (verschwindende Determinante) und führen zu

$$\frac{b_{n'}}{a_{n'}} = \sqrt{\frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon}} = \frac{\sqrt{1+\varepsilon}\, Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon}\,(\lambda - 1 - \gamma - n')}{\sqrt{1-\varepsilon}\, Z\alpha + \sqrt{1+\varepsilon}\,(\lambda + 1 + \gamma + n')} \iff$$

$$(1-\varepsilon) Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\,(\lambda + 1 + \gamma + n') = (1+\varepsilon) Z\alpha + \sqrt{1-\varepsilon^2}\,(\lambda - 1 - \gamma - n') \iff$$

$$\varepsilon Z\alpha = \sqrt{1-\varepsilon^2}\,(1 + \gamma + n') \implies \varepsilon^2\left[(Z\alpha)^2 + (1+\gamma+n')^2\right] = (1+\gamma+n')^2$$

$$\Longrightarrow \varepsilon = \frac{1}{\sqrt{1+\frac{(Z\alpha)^2}{(1+\gamma+n')^2}}}$$

Wir setzen c wieder ein, so daß $E = \varepsilon m c^2$, und damit

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1+\frac{(Z\alpha)^2}{\left[\sqrt{(j+\frac{1}{2})^2-(Z\alpha)^2}+n'\right]^2}}}$$

Für gegebenes n' hängen die Energieeigenwerte nur von j ab, z.B. für $j=\frac{1}{2}$ unabhängig davon, ob $l=0$ oder $l=1$ ist.

Wir definieren $n = j+\frac{1}{2}+n'$. Die Entwicklung in $(Z\alpha)^2$ ergibt dann

$$E = mc^2 - \frac{1}{2}\frac{mc^2(Z\alpha)^2}{n^2} + \frac{3}{8}mc^2\frac{(Z\alpha)^4}{n^4} - mc^2\frac{(Z\alpha)^4}{2(j+\frac{1}{2})n^3} + \ldots$$

Wir erinnern nun an die heuristische Interpretation der Terme

$$\Delta E_{jl} = \frac{mc^2(Z\alpha)^4}{4n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)} * \begin{cases} l & \text{für } j=l+\frac{1}{2} \\ -l-1 & \text{für } j=l-\frac{1}{2} \end{cases}$$

$$= \begin{cases} \dfrac{mc^2(Z\alpha)^4}{4n^3 j(j+\frac{1}{2})} & \text{für } j=l+\frac{1}{2} \\[2ex] -\dfrac{mc^2(Z\alpha)^4}{4n^3(j+1)(j+\frac{1}{2})} & \text{für } j=l-\frac{1}{2} \end{cases} \longrightarrow \text{Spin-Bahn-Kopplung}$$

Wir merken an, daß für $l=0$ dies nicht als Spin-Bahn-Kopplung, sondern als Darwin Term (Zitterbewegung um den Kern) interpretiert wird.

$$\Delta E_{nl} = -\frac{mc^2(Z\alpha)^4}{2n^4}\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right)$$

$$= \frac{3}{8} mc^2 \frac{(Z\alpha)^4}{n^4} - \frac{mc^2 (Z\alpha)^4}{2n^3} * \begin{cases} \frac{1}{j} & \text{für } j = l + \frac{1}{2} \\ \frac{1}{j+1} & \text{für } j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

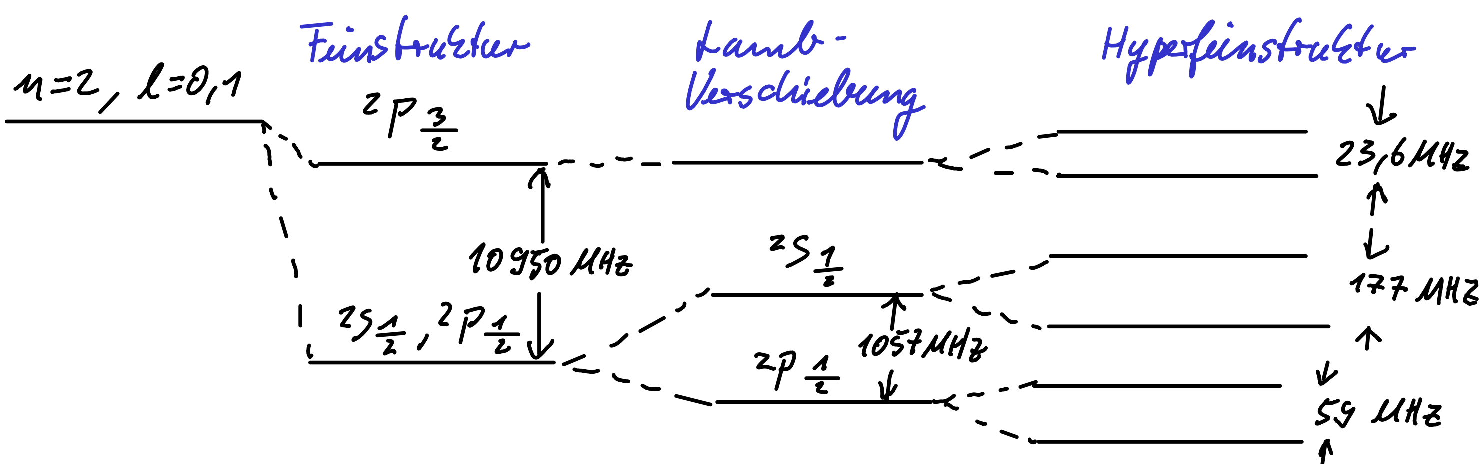
$\longrightarrow$ relativistische kinetische Energie

Die j-abhängigen Terme lassen sich wiederum zusammenfassen mit

$$\frac{1}{4j(j+\frac{1}{2})} - \frac{1}{2j} = -\frac{2j}{4j(j+\frac{1}{2})} = -\frac{1}{2(j+\frac{1}{2})} \qquad \text{für } j = l + \frac{1}{2}$$

$$-\frac{1}{4(j+1)(j+\frac{1}{2})} - \frac{1}{2(j+1)} = -\frac{2(j+1)}{4(j+\frac{1}{2})(j+1)} = -\frac{1}{2(j+\frac{1}{2})} \quad \text{für } j = l - \frac{1}{2}$$

Insgesamt sind die Terme zur Ordnung $(Z\alpha)^4$ also durch $\Delta E_{jl} + \Delta E_{nl}$ gegeben.
Gegenüber den führenden Relativistischen Korrekturen ist die Lamb-Verschiebung um einen Faktor $\sim \alpha \log \alpha$ unterdrückt.
Wir skizzieren die Aufspaltung des $n=2$ Energieniveaus von Wasserstoff aufgrund der hier besprochenen Korrekturen



Dabei entsteht die Hyperfeinstruktur aufgrund der Wechselwirkung des magnetischen Moments des Atomkerns im durch die Elektronen erzeugten Feld.