f) Nichtrelativistischer Grenzfall der Klein-Gordon-Gleichung

$$\Psi(\underline{r},t) = \varphi(\underline{r},t)\, e^{-i/\hbar\, m_0 c^2 t}$$

mit $\varphi(\underline{r},t) = e^{i\underline{k}\underline{r} - \frac{i}{\hbar} E' t}$

$E' = E - m_0 c^2$

Idee: Die Ruheenergie $m_0 c^2$ wird im Zeitfaktor abgespalten

dann: im nicht-rel Grenzfall ist die Ruheenergie die dominierende Energie im System, also:

$$E' = E - m_0 c^2 \ll m_0 c^2$$

$\Rightarrow$ $\varphi(\underline{r},t)$ ist dann nur langsam veränderlich verglichen mit $e^{-i/\hbar\, m_0 c^2 t}$

Betrachte 2. Zeitableitung

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t}\left(\dot{\varphi} - \frac{i}{\hbar} m_0 c^2 \varphi\right) e^{-i/\hbar\, m_0 c^2 t}$$

$$= \left(\ddot{\varphi} - \frac{i}{\hbar} 2 m_0 c^2 \dot{\varphi} - \frac{m_0^2 c^4}{\hbar^2}\varphi\right) e^{-i/\hbar\, m_0 c^2 t}$$

Setze nun $\ddot{\varphi}$ gleich null, da φ nur langsam mit t variiert

(beachte:
Es gilt bereits für die erste Zeitableitung von $\varphi = \varphi_0 e^{i\underline{k}\underline{r} - \frac{i}{\hbar} E' t}$

$|i\hbar\dot{\varphi}| = E'\varphi \leq m_0 c^2 \varphi$)

Kombiniere mit voller KG-Gleichung

$$\left(\Box + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}\right)\Psi = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi = \left(\Delta - \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}\right)\Psi$$

setze $\Psi = \varphi\, e^{-i/\hbar\, m_0 c^2 t}$ und benutze die vorherige Näherung

$$\frac{1}{c^2}\left(-\frac{i}{\hbar}2m_0c^2\dot{\varphi} - \frac{m_0^2c^4}{\hbar^2}\varphi\right)e^{-i/\hbar\, m_0c^2t}$$

$$= \left(\Delta\varphi - \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\varphi\right)e^{-i/\hbar\, m_0c^2t}$$

dividiere auf beiden Seiten durch $e^{-i/\hbar\, m_0c^2t}$
und beachte Aufhebung der Terme $\sim \frac{m_0^2c^9}{\hbar^2}$

$$\Rightarrow -\frac{i}{\hbar}2m_0\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \Delta\varphi$$

$$\Leftrightarrow i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m_0}\Delta\varphi$$

Schrödingergleichung für ein freies Teilchen ohne Spin

g) Ankopplung an das elektromagnetische Feld

Erinnerung

i) klass Elektrodynamik

$$\underset{\text{magn. Induktion}}{\underline{B}} = \underline{\nabla} \times \underset{\text{Vektorpotential}}{\underline{A}}$$

$$\underline{E} = -\underline{\nabla}\phi - \frac{\partial \underline{A}}{\partial t}$$

skalares Potential

physikalische Messgrößen

$\underline{E}$ und $\underline{B}$ ändern sich nicht unter Eichtransformationen

$$\underline{A} \to \underline{A} + \underline{\nabla}\chi$$

$$\phi \to \phi - \frac{\partial}{\partial t}\chi$$

mit χ beliebiger Skalarer Funktion von $\underline{r}$ und t (muss differenzierbar sein)

$$\underline{F}^{\text{Lorentz}} = q\left(\underline{E} + \underline{v} \times \underline{B}\right)$$

(Lorentzkraft invariant unter Eichtransformation)

ii) Ankopplung in der klass. Mechanik:

$$H = \frac{p^2}{2m} \longrightarrow H = \frac{\left(p - \frac{q}{c}\underline{A}\right)^2}{2m} + q\phi$$

Hamiltonfkt.

geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld.

iii) Ankopplung in der nicht-relativistischen Quantenmechanik

Korrespondenzprinzip $\quad H \to \hat{H}, \quad A(\underline{r},t) \to \underline{A}(\hat{\underline{r}},t)$

$$\phi(\underline{r},t) \to \phi(\hat{\underline{r}},t)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \left[\frac{\left(\hat{p} - \frac{q}{c}A(\hat{\underline{r}},t)\right)^2}{2m} + q\,\phi(\hat{\underline{r}},t)\right]\Psi$$

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\,\phi(\hat{\underline{r}},t)\right]\Psi = \frac{\left(\hat{p} - \frac{q}{c}A(\hat{\underline{r}},t)\right)^2}{2m}\Psi$$

man sieht also:

Im Vergleich zur Schrödingergleichung des Teilchens ohne elektromagnetisches Feld wurde ersetzt

$$\hat{p} \Rightarrow \hat{p} - \frac{q}{c} \underline{A}(\hat{\underline{r}}, t) \underset{\text{Ortsdarstellung}}{\Rightarrow} \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} - \frac{q}{c}\underline{A}(\hat{\underline{r}}, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\phi(\underline{r}, t)$$

Gehe nun analog vor

KG-Gleichung ohne Feld

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right)^2 \Psi = \left(\hat{p}^2 + m_0^2 c^2\right) \Psi$$

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\phi\right)^2 \Psi = \left(\left(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} - \frac{q}{c}\underline{A}\right)^2 + m_0^2 c^2\right) \Psi$$

Umschreiben in Vierernotation:

ohne Feld hatten wir

$$\left(\underbrace{\partial^\mu \partial_\mu} + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}\right) \Psi = 0$$

$$\Box = \partial^\mu \partial_\mu = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$$

$$\partial^\mu = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\underline{\nabla}\right)$$

$$\partial_\mu = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \underline{\nabla}\right)$$

$$\partial^\mu \longrightarrow \partial^\mu + \frac{iq}{\hbar c} A^\mu$$ „minimale Kopplung"

wobei $A^\mu = (\phi, \underline{A})$

$A_\mu = (\phi, -\underline{A})$

$$\left(\left(\partial^\mu + \frac{iq}{\hbar c} A^\mu\right)\left(\partial_\mu + \frac{iq}{\hbar c} A_\mu\right) + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}\right) \Psi = 0$$

$$\Leftrightarrow \left(\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \frac{iq}{\hbar c}\phi \right)^2 - \left(\underline{\nabla} - \frac{iq}{\hbar c}\underline{A} \right)^2 + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \Psi = 0$$

$$\Leftrightarrow \left[\left(\frac{i}{\hbar c} \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} + q\phi \right) \right)^2 - \left(\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} - \frac{q}{c}\underline{A} \right) \right)^2 + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right] \Psi = 0$$

$$\left[\frac{1}{c^2} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + q\phi \right)^2 - \left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{q}{c}\underline{A} \right)^2 - m_0^2 c^2 \right] \Psi = 0 \quad \text{ok!!}$$

Beispiel:

KG-Gleichung im Coulombfeld ($\Rightarrow$ Atom!)

$\Rightarrow$ Übung

I.2. Dirac-Gleichung

Warum noch eine weitere Gleichung für den relativistischen Fall?

- KG-Gl. ist Differentialgleichung zweiter Ordnung in Zeit (und Raum)

  $\Rightarrow$ man benötigt Anfangsbedingungen für $\Psi(t=0)$, $\dot{\Psi}(t=0)$

  Das ist formal anders als in der Schrödingergleichung und führt dazu, dass die Dichte negativ werden kann!!

- KG-Gleichung enthält keinen Spin (formal $s=0$)

Suche Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit, die außerdem auf Teilchen mit Spin $s = \frac{1}{2}$ anwendbar ist!

Fordere außerdem "Lorentz-Invarianz"
(d.h. die neue Gl. soll wieder in allen Inertialsystemen dieselbe Struktur haben.)

$\Rightarrow$ Die Gleichung muss auch erster Ordnung in Zeit und Raum sein
(damit formale Symmetrie zwischen Ort und Zeit gewährleistet)

Schließlich: Die Gleichung muss die relativistische Energie-Impuls-Beziehung respektieren

Ansatz (für freies Teilchen)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = H_D \Psi(t) \qquad (*)$$

$$\text{mit} \quad H_D = \Big[c\, \hat{\alpha}^i \underbrace{\hat{p}_i}_{\frac{\hbar}{i}\nabla_i} + \hat{\beta} m_0 c^2 \Big] \qquad i = x, y, z$$

Einsteinische Summenkonvention

Wie kommt man darauf?
(Idee von Dirac: Linearisiere die relativistische Energie-Impuls-Beziehung)

$$E^2 - c^2 p^2 - m_0^2 c^4 = 0$$

mit dem Ansatz

$$\Big(E - c \sum_i \hat{\alpha}^i p_i - \hat{\beta} m_0 c^2\Big)\Big(E + c \sum_j \hat{\alpha}^j \hat{p}_j + \hat{\beta} m_0 c^2\Big) = 0$$

führt bei Ausmultiplikation auf die richtige $\underline{E}$-p-Beziehung, falls:

$$\hat\alpha^i\hat\alpha^j + \hat\alpha^j\hat\alpha^i = 2\delta_{ij}\hat{1}$$
$$\hat\alpha^i\hat\beta + \hat\beta\hat\alpha^i = 0$$
$$\hat\beta^2 = \hat{1}$$

außerdem: $\hat\alpha^i, \hat\beta$ müssen mit $\hat p_i$ kommutieren

$\Rightarrow$ müssen Ortsunabhängig sein

Betrachte nur den hinteren Faktor und benutze Korrespondenzprinzip

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \qquad \hat p = \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}$$

$$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} - c\alpha_i\frac{\hbar}{i}\partial_i\psi - \beta m_0 c^2\psi = 0 \Rightarrow (*)$$

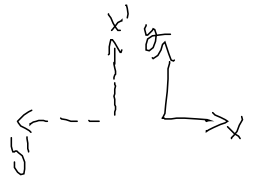
Alternative (kompakte) Schreibweise für Dirac-Operator

$$\hat H_D = c\,\underline{\hat\alpha}\cdot\underline{p} + \hat\beta m_0 c^2 \qquad \underline{\hat\alpha} = (\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3)$$

Frage nun: Was sind die Koeffizienten α^i und β?

Problem: die α^i können nicht einfach Zahlen sein
sonst keine Forminvarianz unter Drehung

(Bsp.



$x' = y \qquad \partial_y = \partial_{x'}$

$y' = -x \qquad \partial_x = -\partial_{y'}$

Daher nimmt man an (Dirac):

Die $\hat\alpha_i$ und $\hat\beta$ sind hermitische $N\times N$ Matrizen.
Damit ist auch $\hat H_D$ hermitesch und es kann eine positive Wahrscheinlichkeitsdichte existieren

Damit folgt:

Ψ ist N-dim Vektor, $\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix}$ „Spinor"

Erinnerung

Die Dirac-Gleichung soll mit der relativistischen E-p-Beziehung konsistent sein

→ Die Komponenten von Ψ müssen die Klein-Gordon-Gleichung erfüllen. Denn dann wissen wir, dass ebene Wellen die Beziehung $E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$ erfüllen!!

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underline{\Psi}\right) = H_D\left(H_D\underline{\Psi}\right)$$

$$\Rightarrow \quad -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\underline{\Psi} = \left(c\frac{\hbar}{i}\hat{\alpha}^i\partial_i + \hat{\beta}m_0c^2\right)\left(c\frac{\hbar}{i}\hat{\alpha}^j\partial_j + \hat{\beta}m_0c^2\right)\underline{\Psi}$$

$$= -\hbar^2c^2\hat{\alpha}^i\partial_i\hat{\alpha}^j\partial_j\underline{\Psi}$$

$$+ \frac{\hbar m_0c^3}{i}\left(\hat{\alpha}^i\partial_i\hat{\beta} + \hat{\beta}\hat{\alpha}^j\partial_j\right)\underline{\Psi}$$

$$+ \hat{\beta}^2m_0^2c^4\underline{\Psi}$$

→ nächste Woche