Dirac-Gleichung klassische Näherung

Die nicht relativistische (also klassische) Näherung der Dirac-Gleichung ergibt die uns schon bekannte **Pauli-Gleichung**. Wir starten mit der Dirac-Gleichung in kanonischer Form

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x) = c\left(\vec{\alpha}\vec{p} + \beta mc\right)\psi(x) \tag{1}$$

Nun betrachten ein Teilchen in einem elektromagnetischen Feld. Dazu führen wir den veralgemeinerten Impuls ein

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \tag{2}$$

Und das Skalarpotential $\Phi = cA^0$. Somit erhalten wir die Dirac-Gleichung in einem elektromagnetischen Potential

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x) = c\left(\vec{\alpha}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) + \frac{e}{c}\Phi + \beta mc\right)\psi(x) \tag{3}$$

Um diese Gleichung zu lösen machen wir folgenden Ansatz

$$\psi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2 t}\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix} \tag{4}$$

Eingesetzt in die Gleichung (3) mit dem verallgemeinen Impuls $\vec{\pi} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$ ergibt

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2 t}\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix}\right] &= c\left(\vec{\alpha}\vec{\pi} + \frac{e}{c}\Phi + \beta mc\right)e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2 t}\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix}\\
mc^2\cancel{e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2 t}}\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix} + \cancel{e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2 t}}i\hbar\begin{pmatrix}\dot{\phi}\\ \dot{\chi}\end{pmatrix} &= c\left(\begin{pmatrix}0 & \vec{\sigma}\vec{\pi}\\ \vec{\sigma}\vec{\pi} & 0\end{pmatrix} + \frac{e}{c}\Phi + \begin{pmatrix}\mathbb{1}_2 & 0\\ 0 & -\mathbb{1}_2\end{pmatrix}mc\right)\cancel{e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2 t}}\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix}\\
mc^2\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix} + i\hbar\begin{pmatrix}\dot{\phi}\\ \dot{\chi}\end{pmatrix} &= c\left(\begin{pmatrix}0 & \vec{\sigma}\vec{\pi}\\ \vec{\sigma}\vec{\pi} & 0\end{pmatrix} + \frac{e}{c}\Phi + \begin{pmatrix}\mathbb{1}_2 & 0\\ 0 & -\mathbb{1}_2\end{pmatrix}mc\right)\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix}\\
mc^2\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix} + i\hbar\begin{pmatrix}\dot{\phi}\\ \dot{\chi}\end{pmatrix} &= c\begin{pmatrix}0 & \vec{\sigma}\vec{\pi}\\ \vec{\sigma}\vec{\pi} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix} + e\Phi\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\mathbb{1}_2 & 0\\ 0 & -\mathbb{1}_2\end{pmatrix}mc^2\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix}\\
mc^2\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix} + i\hbar\begin{pmatrix}\dot{\phi}\\ \dot{\chi}\end{pmatrix} &= c\begin{pmatrix}\vec{\sigma}\vec{\pi}\chi\\ \vec{\sigma}\vec{\pi}\phi\end{pmatrix} + e\Phi\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix} + mc^2\begin{pmatrix}\phi\\ -\chi\end{pmatrix} \qquad \Big| - mc^2\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix}\\
i\hbar\begin{pmatrix}\dot{\phi}\\ \dot{\chi}\end{pmatrix} &= c\begin{pmatrix}\vec{\sigma}\vec{\pi}\chi\\ \vec{\sigma}\vec{\pi}\phi\end{pmatrix} + e\Phi\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix} + 2mc^2\begin{pmatrix}0\\ -\chi\end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{5}$$

Hieraus ergeben sich zwei gekoppelte Differentialgleichungen

$$i\hbar\dot{\phi} = c\vec{\sigma}\vec{\pi}\chi + e\Phi\phi \tag{6}$$

$$i\hbar\dot{\chi} = c\vec{\sigma}\vec{\pi}\phi + e\Phi\chi - 2mc^2\chi \tag{7}$$

Nun wollen wir die Gleichung (7) untersuchen

$$\begin{aligned}
\underbrace{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}}_{E_s}\chi &= c\vec{\sigma}\vec{\pi}\phi + e\Phi\chi - 2mc^2\chi\\
(2mc^2 + E_s - e\Phi)\chi &= c\vec{\sigma}\vec{\pi}\phi\\
\Leftrightarrow \chi &= \frac{c\vec{\sigma}\vec{\pi}\phi}{2mc^2 + E_s - e\Phi}
\end{aligned} \tag{8}$$

Bei nicht relativistischen Grenzfall ist die Ruhe-Energie mc^2 die Größte Energie im Vergleich zu E_s und $-e\Phi$. Zum Beispiel für ein Elektron gilt $2mc^2 \approx 10MeV$ und Schrödigner-Energie $E_s \approx 13eV$ und für die potentielle Energie $e\Phi = \frac{e^3}{a_0} \approx 1\cdot 10^{-27}eV$. Also können wir die zwei Energieen E_s und $e\Phi$ in Gleichung (8) vernachlässigen und erhalten folgenden Näherung

$$\chi \approx \frac{c\vec{\sigma}\vec{\pi}}{2mc^2}\phi = \frac{\vec{\sigma}\vec{\pi}}{2mc}\phi \tag{9}$$

Die Spinor-Komponente χ nennt man auch die **kleine** und ϕ als **große** Komponente des Dirac-Spinors. Zum Beweis machen wir folgende Abschätzung

$$\chi = \frac{\vec{\sigma}\vec{\pi}}{2mc}\phi \approx \frac{\vec{p}}{2mc}\phi = \frac{m\vec{v}}{2mc}\phi = \frac{\vec{v}}{2c}\phi \tag{10}$$

D.h. χ ist um den Proportionalitätsfaktor $\frac{v}{c}$ kleiner als ϕ. Mit Sicherheit ist $|\frac{v}{c}| \ll 1$.
Die Näherung (9) für die kleine Komponente setzen wir in die erste Differentialgleichung (6) ein und erhalten eine Differentialgleichung die nur noch von ϕ abhängig ist

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\phi} &= c\vec{\sigma}\vec{\pi}\frac{\vec{\sigma}\vec{\pi}}{2mc}\phi + e\Phi\phi \\ &= \frac{(\vec{\sigma}\vec{\pi})^2}{2m}\phi + e\Phi\phi \end{aligned} \tag{11}$$

Wir möchten nun den Term $(\vec{\sigma}\vec{\pi})^2$ berechnen

$$(\vec{\sigma}\vec{\pi})^2 = \sum_{i,j}\sigma_i\sigma_j\pi_i\pi_j \tag{12}$$

Mit der Relation der Pauli-Matrizen

$$\begin{aligned} \sigma_i\sigma_j &= \frac{1}{2}\sigma_i\sigma_j + \frac{1}{2}\sigma_i\sigma_j \\ &= \frac{1}{2}\sigma_i\sigma_j - \frac{1}{2}\sigma_j\sigma_i + \frac{1}{2}\sigma_i\sigma_j + \frac{1}{2}\sigma_j\sigma_i \\ &= \frac{1}{2}\underbrace{[\sigma_i,\sigma_j]}_{2i\epsilon_{ijk}\sigma_k} + \frac{1}{2}\underbrace{\{\sigma_i,\sigma_j\}}_{2\delta_{ij}} \\ &= \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k \end{aligned} \tag{13}$$

eingesetzt in die Gleichung (12)

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma}\vec{\pi})^2 &= \sum_{i,j}(\delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k)\pi_i\pi_j \\ &= \sum_{i,j}\delta_{ij}\pi_i\pi_j + i\sum_{i,j}\epsilon_{ijk}\sigma_k\pi_i\pi_j \\ &= (\vec{\pi})^2 + i\sigma_k\sum_{i,j}\epsilon_{ijk}\pi_i\pi_j \end{aligned} \tag{14}$$

Mit einer Nebenrechnung und der Bedienung fürs Vorzeichenwechseln beim antizyklischen Vertauscchen des Epsilontensors $\epsilon_{ijk}\pi_i\pi_j = \epsilon_{jik}\pi_j\pi_i = -\epsilon_{ijk}\pi_j\pi_i$

$$\begin{aligned} \epsilon_{ijk}\pi_i\pi_j &= \frac{1}{2}(\epsilon_{ijk}\pi_i\pi_j + \underbrace{\epsilon_{ijk}\pi_i\pi_j}_{-\epsilon_{ijk}\pi_j\pi_i}) \\ &= \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}[\pi_i,\pi_j] \\ &= \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}[(\frac{\hbar}{i}\nabla_i - \frac{e}{c}A_i),(\frac{\hbar}{i}\nabla_j - \frac{e}{c}A_j)] \\ &= \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\left(\underbrace{[\frac{\hbar}{i}\nabla_i,\frac{\hbar}{i}\nabla_j]}_{=0} - [\frac{\hbar}{i}\nabla_i,\frac{e}{c}A_j] - [\frac{e}{c}A_i,\frac{\hbar}{i}\nabla_j] + \underbrace{[\frac{e}{c}A_i,\frac{e}{c}A_j]}_{=0}\right) \\ &= -\frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\frac{\hbar e}{ic}\left([\nabla_i,A_j] + [A_i,\nabla_j]\right) \\ &= -\frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\frac{\hbar e}{ic}\left(\nabla_iA_j - A_j\nabla_i + A_i\nabla_j - \nabla_jA_i\right) \end{aligned} \tag{15}$$

Um die Klammer zu vereinfachen wenden wir sie auf eine stetig differenzierbare Funktion ψ an

$$\begin{aligned}
&\nabla_i(A_j\psi) - A_j\nabla_i(\psi) + A_i\nabla_j(\psi) - \nabla_j(A_i\psi) = \\
=&\nabla_i(A_j)\psi + \cancel{A_j\nabla_i(\psi)} - \cancel{A_j\nabla_i(\psi)} + \cancel{A_i\nabla_j(\psi)} - \nabla_j(A_i)\psi - \cancel{A_i\nabla_j(\psi)} \\
=&\nabla_i(A_j)\psi - \nabla_j(A_i)\psi
\end{aligned} \tag{16}$$

Eingesetzt in (15)

$$\begin{aligned}
\epsilon_{ijk}\pi_i\pi_j &= -\frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\frac{\hbar e}{ic}\left(\underbrace{\nabla_i A_j - A_j\nabla_i + A_i\nabla_j - \nabla_j A_i}_{\nabla_i A_j - \nabla_j A_i}\right) \\
\epsilon_{ijk}\pi_i\pi_j &= -\frac{1}{2}\frac{\hbar e}{ic}\epsilon_{ijk}\left(\nabla_i A_j - \nabla_j A_i\right)
\end{aligned} \tag{17}$$

Setzen wir die Gleichung aus der Nebenrechnung (17) in die Gleichung (14) nun ein

$$\begin{aligned}
(\vec{\sigma}\vec{\pi})^2 &= \vec{\pi}^2 - i\frac{1}{2}\frac{\hbar e}{ic}\sigma_k\sum_{i,j}\epsilon_{ijk}\left(\nabla_i A_j - \nabla_j A_i\right) \\
&= \vec{\pi}^2 - \frac{1}{2}\frac{\hbar e}{c}\sigma_k\left(\sum_{i,j}\epsilon_{ijk}\nabla_i A_j - \sum_{i,j}\epsilon_{ijk}\nabla_j A_i\right) \qquad \text{mit } \epsilon_{ijk}\nabla_j A_i = -\epsilon_{ijk}\nabla_i A_j \\
&= \vec{\pi}^2 - \frac{\hbar e}{c}\sigma_k\underbrace{\sum_{i,j}\epsilon_{ijk}\nabla_i A_j}_{(\vec{\nabla}\times\vec{A})_k} \\
&= \vec{\pi}^2 - \frac{\hbar e}{c}\,\vec{\sigma}\cdot\underbrace{(\vec{\nabla}\times\vec{A})}_{\vec{B}} \\
&= \vec{\pi}^2 - \frac{\hbar e}{c}\,\vec{\sigma}\cdot\vec{B}
\end{aligned} \tag{18}$$

Die Gleichung (18) setzen wir in unsere ursprüngliche erste Differetialgleichung (11) ein

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi &= \left(\frac{(\vec{\sigma}\vec{\pi})^2}{2m} + e\Phi\right)\phi \\
&= \left(\frac{\vec{\pi}^2}{2m} - \frac{\hbar e}{2mc}\,\vec{\sigma}\cdot\vec{B} + e\Phi\right)\phi
\end{aligned} \tag{19}$$

Setzen wir für $\vec{\pi} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$ in die Gleichung (19) ein so erhalten wir die schon aus der nicht relativistischen Quantenmechanik bekannte **Pauli-Gleichung**

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi = \left[\frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 - \frac{\hbar e}{2mc}\,\vec{\sigma}\cdot\vec{B} + e\Phi\right]\phi} \tag{20}$$

Referenzen

- Schwabl