

Kapitel 1.4: Dirac-Gleichung

Problem: Die Schrödinger-Gleichung beruht auf dem nichtrelativistischen Ansatz

$$\left(E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad \begin{array}{c} \text{QM} \\ \longrightarrow \\ \text{Operatoren} \end{array} \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}|} \right)$$

insbesondere: linear in der Zeit aber quadratisch in den Ortskoordinaten:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \dots \nabla^2 \dots$$

Die Schrödinger-Gleichung ist daher nicht relativistisch invariant. Dieses Problem wurde schon früh in der Entwicklung der QM erkannt (1925 ...28).

Vorbemerkung:

Interessant ist, dass die relativistische Behandlung nicht nur Korrekturen durch die ‚Bewegung‘ in der Größenordnung $dE/E \sim 10^{-5}$ ergibt (entsprechend v_{e1}/c), sondern konzeptionell eine ganz andere Beschreibung erfordert (vierer-Vektoren, die als Teilchen-Anteilchen Zustände mit Spin interpretiert werden können)!

1. Ansatz für eine Lösung des Problems:

Die relativistische Energie-Impuls-Beziehung als Ausgangspunkt wählen:

$$E^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4$$

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 = c^2 (-i\hbar \vec{\nabla})^2 + m_0^2 c^4$$

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2 + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \Psi = 0$$

Dies ist die sogenannte „Klein-Gordon-Gleichung“ (1926/27 entwickelt)

Die Klein-Gordon-Gleichung beschreibt Teilchen mit Spin null!

Sie kann daher das H-Atom und dessen Spektrum nicht korrekt beschreiben!

(siehe z.B. I.O.Bjorken/S.Drell: Relativistische Quantenmechanik, BI-Hochschultaschenbücher, Band 98, 1966/1984)

2. Ansatz:

Ist ein linearer Zusammenhang in E und p möglich, der dennoch die relativistische Energie-Impuls-Beziehung erfüllt?

$$\text{Ansatz: } E = \alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z + \beta m_0 c^2$$

$$\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -i\hbar \left(\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial z} \right) \Psi + \beta m_0 c^2 \Psi$$

Wenn zusätzlich $E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$ erfüllt sein soll,

dann ergeben sich daraus Bedingungen für die Koeffizienten:

$$\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i = 2\delta_{ik} \quad , \quad \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \quad , \quad \beta^2 = 1$$

Diese Bedingungen sind mit komplexen Zahlen nicht zu erfüllen.

Idee Dirac 1928: α_i, β müssen Matrizen sein!

Es folgt mathematisch, dass die kleinste mögliche Dimension für die Matrizen 4 x 4 Matrizen sind.

Aus einigen weiteren mathematischen und physikalischen Nebenbedingungen folgt dann die Struktur der Dirac-Gleichung (siehe z.B. Bjorken/Drell):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Phi_{1(\vec{r},t)} \\ \Phi_{2(\vec{r},t)} \\ \chi_{1(\vec{r},t)} \\ \chi_{2(\vec{r},t)} \end{pmatrix} = \left[c \cdot \begin{pmatrix} & \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ 0 & \\ & \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & 0 \end{pmatrix} + m_0 c^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \\ 0 & 1 & & \\ & & -1 & 0 \\ 0 & & 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \Phi_{1(\vec{r},t)} \\ \Phi_{2(\vec{r},t)} \\ \chi_{1(\vec{r},t)} \\ \chi_{2(\vec{r},t)} \end{pmatrix}$$

wobei

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{p} = -i\hbar \left[\underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{\sigma_x} \frac{\partial}{\partial x} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}}_{\sigma_y} \frac{\partial}{\partial y} + \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_{\sigma_z} \frac{\partial}{\partial z} \right]$$

$\vec{\sigma} \cdot \vec{p}$ koppelt über die Nebendiagonalelemente der Matrix die oberen beiden Vektor-Einträge mit den unteren beiden.

Anmerkung: Dies ist zunächst die Dirac-Gleichung für ein freies (fermionisches) Teilchen, für gebundene Systeme und externe Felder kommen dann natürlich zusätzliche Wechselwirkungsterme hinzu!

Interpretation der Dirac-Gleichung

Teilchen mit halbzahligem Spin werden relativistisch korrekt über eine vierkomponentige Wellenfunktion (Spinor) beschrieben.

Für eine erste Interpretation: Spezialfälle betrachten!

a) Lösungen für $p \rightarrow 0$ (z.B. 'stehende Wellen') Teilchen in (unendlichem) Kasten

Separation der Komponenten möglich:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{pmatrix} = m_0 c^2 \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{pmatrix}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = -m_0 c^2 \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}$$

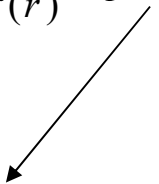


Energie-Eigenwert Gleichung mit Eigenwerten

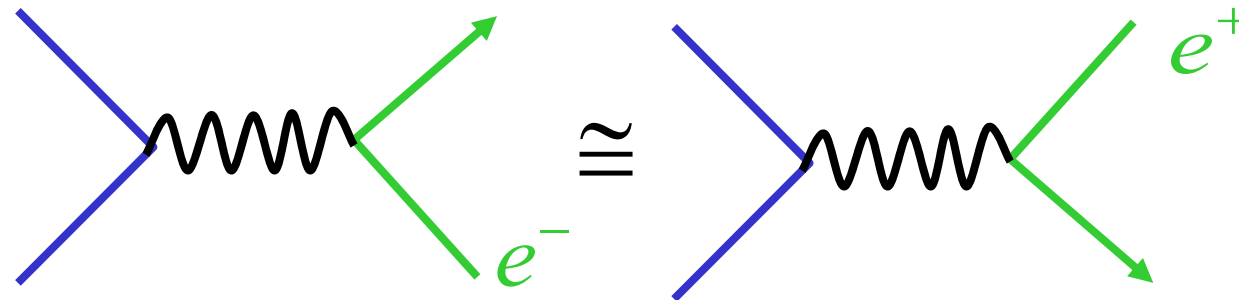
$$E_a = +m_0 c^2 \quad \text{und} \quad E_b = -m_0 c^2 \quad (!?!?)$$

Zustände negativer Energie können als Antiteilchen interpretiert werden **!**

Lösungen sind ebene Wellen:

$$\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \text{Ampl.}_{(\vec{r})} \cdot e^{i\frac{E}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$


Lösungen zu negativer Energie entsprechen Antiteilchen,
die rückwärts in der Zeit propagieren!



Die relativistische Behandlung von Teilchen über die Dirac-Gleichung
"motiviert" die "Existenz" von Antiteilchen !

Zudem läßt sich festhalten:

Die jeweils zweikomponentigen Anteile $\begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}$ beschreiben

Teilchen mit 2-Spin-Einstellungen, d.h. Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen !!

Die Forderung nach einer korrekten relativistischen Beschreibung führt mathematisch zwingend auf eine Gleichung die inhärent über die Pauli-Matrizen ($\vec{\sigma} \cdot \vec{p}$ – *Terme*) genau Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen "fordert"!

etwas provokant:

"Spin folgt aus der Dirac-Gleichung" !

Weitere Betrachtung von Spezialfällen für Interpretation:

b) nichtrelativistischer Grenzfall: $\frac{p^2}{2m} \ll m_0 c^2$

Wir werden unten sehen, dass sich in diesem Fall als Lösung ergibt:

$$\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2m_0 c} \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{pmatrix}$$

→ Für nichtrelativistisches Teilchen sind die beiden unteren Spinor-Komponenten um den Faktor $\frac{|\vec{p}|}{2m_0 c}$ gegenüber den oberen Komponenten unterdrückt!

→ Nomenklatur:

$$\begin{array}{l} \textit{Spin up} \\ \textit{Spin down} \end{array} \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{pmatrix} \leftarrow \text{'gro\ss e' Komponenten}$$

$$\begin{array}{l} \textit{Spin up} \\ \textit{Spin down} \end{array} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} \leftarrow \text{'kleine' Komponenten}$$

(Bem.: für Antiteilchen anders herum!)

Lösungsskizze für den nichtrelativistischen Grenzfall:

'Idee': Abseparation der Ruheenergie als 'schnelle' Oszillation:

$$\text{Ansatz: } \begin{pmatrix} \vec{\Phi} \\ \vec{\chi} \end{pmatrix} = e^{-i\omega_0 t} \begin{pmatrix} \vec{u}_{(\vec{r},t)} \\ \vec{v}_{(\vec{r},t)} \end{pmatrix} \quad \hbar\omega_0 = m_0 c^2$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \vec{\Phi} \\ \vec{\chi} \end{pmatrix} = \left[m_0 c^2 \begin{pmatrix} \vec{u} \\ \vec{v} \end{pmatrix} + i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\vec{u}} \\ \dot{\vec{v}} \end{pmatrix} \right] e^{-i\omega_0 t}$$

Einsetzen in Dirac-Gleichung:

$$\left[m_0 c^2 \begin{pmatrix} \vec{u} \\ \vec{v} \end{pmatrix} + i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\vec{u}} \\ \dot{\vec{v}} \end{pmatrix} \right] e^{-i\omega_0 t} = \left(c (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \begin{pmatrix} \vec{v} \\ \vec{u} \end{pmatrix} + m_0 c^2 \begin{pmatrix} \vec{u} \\ -\vec{v} \end{pmatrix} \right) e^{-i\omega_0 t}$$

(verkürzte Schreibweise der 4x4 Matrizen!)

$$\Rightarrow \quad i\hbar\dot{\vec{u}} = c (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \vec{v}$$

$$i\hbar\dot{\vec{v}} = c (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \vec{u} - 2m_0c^2\vec{v}$$

\vec{u} und \vec{v} sollen nur schwach zeitabhängig sein

$\dot{\vec{u}} = \dot{\vec{v}} = 0$ ist zu stark, weil dann $\vec{u} = \vec{v} = 0$, daher: $\dot{\vec{v}} = 0$

zeitliche Änderung der "kleinen" Komponente vernachlässigen!

$$2. \text{ Gl.} \quad \vec{v} = \frac{1}{2m_0c} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \vec{u}$$

$$1. \text{ Gl.} \quad i\hbar\dot{\vec{u}} = \frac{1}{2m_0} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 \vec{u}$$

$$\text{wobei } \vec{\sigma} \cdot \vec{p} = \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix}$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) = \begin{pmatrix} p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 & 0 \\ 0 & p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \end{pmatrix} = \vec{p}^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Somit erhalten wir für \vec{u} :

$$i\hbar\dot{\vec{u}} = \frac{\vec{p}^2}{2m_0} \vec{u} \quad \vec{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$$

Im nichtrelativistischen Grenzfall erhält man durch den Ansatz für ein freies Teilchen (!),

$$\begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = e^{-i\omega_0 t} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{1(\bar{r},t)} \\ \mathbf{u}_{2(\bar{r},t)} \\ \mathbf{v}_{1(\bar{r},t)} \\ \mathbf{v}_{2(\bar{r},t)} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \hbar\omega_0 = m_0 c^2$$

die Gleichung:
$$i\hbar \dot{\vec{u}} = \frac{\vec{p}^2}{2m_0} \vec{u}$$

Dies ist die Schrödinger-Gleichung für die "großen" Komponenten, d.h. eine Schrödinger-Gleichung für Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen mit einem 2-komponentigen Spinor.

Aber wichtig: auch die "kleinen" Komponenten mischen bei, d.h. verschwinden

nicht, sind jedoch um den Faktor $\frac{|\vec{p}|}{2m_0 c}$ untersetzt.

(im Wasserstoff-Atom: $\frac{v}{c} \approx \frac{1}{137}$)

Berechnung des Wasserstoff-Atoms mit Hilfe der Dirac-Gleichung

siehe z.B. - Friedrich: Theoretische Atomphysik oder
- Bjorken/Drell: Relativistische QM

Zeitseparation, um die stationäre Dirac-Gleichung zu erhalten.
(Ist analog zur Schrödinger-Gleichung auch hier der erste Schritt.)

Ansatz
$$\begin{pmatrix} \vec{\Phi}_{(\vec{r},t)} \\ \vec{\chi}_{(\vec{r},t)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{\Phi}_{(\vec{r})} \\ \vec{\chi}_{(\vec{r})} \end{pmatrix} \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

→ Vereinfachte gekoppelte Gleichungen:

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \vec{\Phi}_{(\vec{r})} &= \frac{1}{c} (E - m_0 c^2) \vec{\chi}_{(\vec{r})} \\ (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \vec{\chi}_{(\vec{r})} &= \frac{1}{c} (E + m_0 c^2) \vec{\Phi}_{(\vec{r})} \end{aligned} \quad \text{hier: } E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Einführung des Coulomb-Potentials: $V_{(r)} = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$

Dies ist eigentlich nicht trivial und streng genommen nicht korrekt, da im relativistischen Zweikörper-Problem Schwerpunkt- und Relativ-Bewegung nicht so einfach separierbar sind. Dennoch ist dies zunächst gerechtfertigt, da der Kern etwa 1836-fach schwerer ist.

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \vec{\Phi}_{(\vec{r})} = \frac{1}{c} (\mathbb{E} - V_{(r)} - m_0 c^2) \vec{\chi}_{(\vec{r})}$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \vec{\chi}_{(\vec{r})} = \frac{1}{c} (\mathbb{E} - V_{(r)} + m_0 c^2) \vec{\Phi}_{(\vec{r})}$$

Diese gekoppelten Differentialgleichungen für die stationäre Dirac-Gleichung eines Elektrons in einem Coulomb-Zentralpotential sind analytisch lösbar.

Analoger Lösungsweg (Separationsansatz für Winkel- und Radial-Anteile) wie bei der Behandlung der Schrödinger-Gleichung, nur ‚aufwändiger‘.

Ergebnis der Berechnung für die Energie-Eigenwerte:

$$E_{n,j} = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha}{n - \delta_j}\right)^2}} \quad \delta_j = j + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2}$$

Entwickeln der Wurzel führt auf:

$$E_{n,j} = m_0 c^2 \left[1 - \frac{\alpha^2}{2n^2} - \frac{\alpha^4}{2n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) + \dots \right]$$

↑
Schrödinger
(=Bohr)

↑
vollständig relativistische
Korrekturen, incl. Spin!

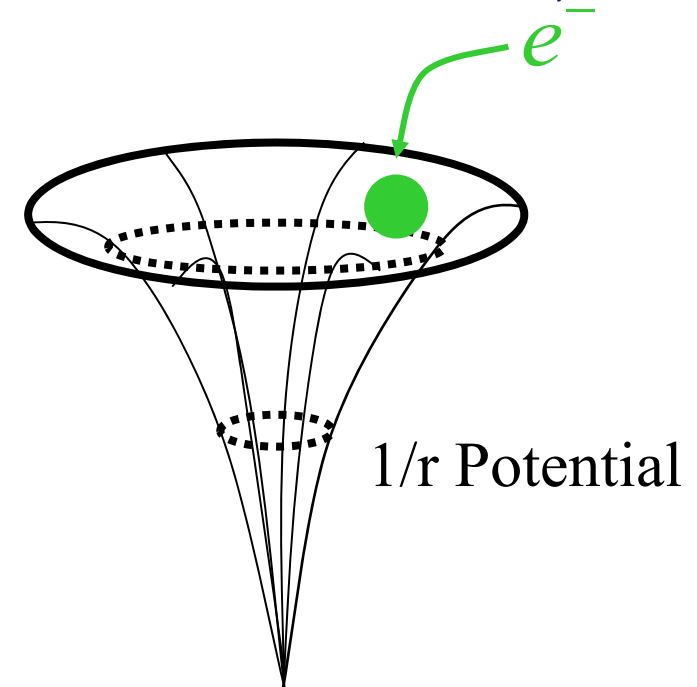
Voll relativistisch ergibt sich für ein Elektron im $1/r$ -Potential eine Entartung nach der j -Quantenzahl (d.h. z.B. $2S_{1/2}$ und $2P_{1/2}$ haben die gleiche Energie, im Gegensatz zu $2P_{1/2}$ und $2P_{3/2}$).

Zusammenfassung:

Die stationäre Dirac-Gleichung für ein Elektron in einem Coulomb-Potential

$\left(V_{(0)} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} \right)$ ergibt die 'korrekten' Energiezustände des Wasserstoffatoms, inkl.

- Einfluss des Spins,
- Spin-Bahn-Kopplung,
- rel. Massenzunahme und
- Beimischung der 'kleinen Komponenten'.



Nicht berücksichtigt sind bisher allerdings

- Einflüsse des Kerns (Ladungsverteilung, Spin) Kernspin-Bahn-Kopplung,
- Einflüsse des Vakuums, d.h. Kopplung an elektromagnetische Felder!!
→ Quanten-Elektrodynamische Korrekturen!

g-Faktor des Elektrons

WW eines 'freien' Elektrons mit einem externen(!) Magnetfeld $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$:

Diese WW wird beschrieben durch die Kopplung:

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$$

(sogenannte 'minimale Kopplung', folgt aus der Eichinvarianz und dem relativistischen Ansatz)

Dirac-Gleichung für Elektron in magn. Feld:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \vec{\Phi} \\ \vec{\lambda} \end{pmatrix} = \left[c \cdot \vec{\sigma} (\vec{p} - e \cdot \vec{A}) + m_0 c^2 \beta \right] \cdot \begin{pmatrix} \vec{\Phi} \\ \vec{\lambda} \end{pmatrix}$$

⋮ nach einiger Rechnung folgt für die 'große' Komponente:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \vec{\Phi} = \left(\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + e\vec{A} \right)^2 + \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \vec{B} \right) \vec{\Phi} \quad \underline{\text{Pauli-Gleichung}}$$

Vergleich des zweiten Terms mit: $\mathbf{E} = -\vec{\mu}\vec{B}$

ergibt:
$$\vec{\mu} = \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} = \frac{e\hbar}{2m} \cdot 2 \frac{\vec{s}}{\hbar}$$

Vergleich mit der Definition von μ :

$$\vec{\mu} = g \cdot \mu_B \cdot \frac{\vec{s}}{\hbar} \quad \mu_B := \frac{e\hbar}{2m_l}$$

ergibt schließlich:
$$g_{e^-} = 2$$

Aus der Dirac-Gleichung folgt, dass ein freies Elektron-Spin $\frac{1}{2}$ hat und ein magnetisches Moment $\vec{\mu} = 2 \cdot \mu_B \frac{\vec{s}}{\hbar}$, d.h. das magnetische Moment ist doppelt so groß wie das 'klassische' magnetische Moment eines Drehimpulses



Anmerkung zum g-Faktor und die Dirac-Gleichung:

Wenn die Dirac-Gleichung alle geladenen strukturlosen Teilchen mit Spin beschreibt (alle Fermionen), so müssen diese alle den g-Faktor $g=2$ haben !?

Vgl. Proton (aus Messung (1933)):

$$g_p = 5.5858$$

Neutron (aus Messung 1948):

$$g_N = -3.8261$$

Hinweis auf Struktur von Proton und Neutron!

Erst später im Quark-Modell erklärbar!

(Bis heute sind g-Faktoren für Proton/Neutron nicht berechenbar!)

Weitere Anmerkung zur Dirac-Gleichung:

Wiederum wurde nicht das elektromagnetische Vakuumfeld berücksichtigt, das auf ein freies Teilchen im freien Raum wirkt. Dies verursacht sogenannte Strahlungskorrekturen, die zur Folge haben, dass:

$$g \neq 2.0\dots$$

(g-2)-Experimente: $\frac{g-2}{2} = 1,1596521884\dots \cdot 10^{-3}$

Extrem genauer Test der QED für freie Teilchen bei niedrigen Energien!

Derzeitige Werte:

$$g_{\text{Elektron, theoretisch}} = 2,002\,319\,304\,8(8),$$

$$g_{\text{Elektron, gemessen}} = 2,002\,319\,304\,361\,53(53)$$

Nochmals Erinnerung an Interpretation der Dirac-Gleichung:

Ein relativistisches -d.h. streng genommen jedes – fermionisches Teilchen wird durch einen 4-Vektor beschrieben.

$$\left(\begin{array}{l} \Phi_{1(\vec{r},t)} \\ \Phi_{2(\vec{r},t)} \\ \chi_{1(\vec{r},t)} \\ \chi_{2(\vec{r},t)} \end{array} \right) \begin{array}{l} \text{Spin up} \\ \text{Spin down} \\ \text{Spin up} \\ \text{Spin down} \end{array} \quad \begin{array}{l}) \text{ eines 'Teilchens' zu positiver Energie} \\ \\) \text{ eines 'Antiteilchens' zu neg. Energie} \end{array}$$

- historische Interpretation:

Lösungen zu negativer Energie sind alle stets aufgefüllt → 'Dirac See'.

- "moderne" Interpretation:

Lösungen zu negativer Energie beschreiben Antiteilchen (die, rückwärts in der Zeit propagierend dann, als Lösungen positiver Energie, äquivalent zu Teilchen sind).

Es bleibt dann jedoch die Frage:

Wieso sind selbst für niedrige kinetische Energien alle 4 Einträge zu berücksichtigen (obwohl die "kleinen" unteren Komponenten um $\frac{|p|}{2m_0c}$ unterdrückt sind)?

Eine Separation ist exakt nicht immer möglich!

Antwort:

Hier kommt die Dirac-Gleichung als Einteilchen-Gleichung an ihre Grenzen!

Ein gleichzeitig vorhandener 'Antiteilchen-Beitrag' würde bereits ein 2-Teilchen-System darstellen!

In gleicher Größenordnung wie die Korrekturen durch nicht exakte Separation der Dirac-Gleichung (Näherungen in Separationslösung für H-Atom) liegen auch die weiteren quantenelektrodynamischen Korrekturen (Lamb-shift!)

Nur eine echte Vielteilchen-Feldtheorie (Vielteilchen-QED) ergibt eine vollständig konsistente Darstellung!

(siehe z.B. auch g-Faktor! $\longrightarrow g_{Dirac} = 2.0$ $g_{QED}^{Vielteilchen} = 2,002319\dots$)