Vorlesung 24

Nicht-relativistische Näherung der Dirac-Gleichung

Wir haben gesehen, dass die Dirac-Gleichung uns unvermeidlich zur Beschreibung vom Spin des Elektrons führt. Wir haben auch gesehen, dass im Rahmen der Dirac-Gleichung die Wechselwirkung des Elektrons mit dem elektromagnetischen Feld durch Eichinvarianz fixiert ist. Wir hoffen dann, dass die Dirac-Gleichung es uns ermöglicht das gyromagnetische Verhältnis des Elektrons zu erklären. Um dass zu machen, müssen wir den nicht-relativischen Limes der Dirac-Gleichung studieren.

Zur Erinnerung: die Dirac-Gleichung lautet

$$(i\hat{\partial} - \frac{mc}{\hbar})\Psi = 0, \tag{1}$$

wobei

$$\hat{\partial} = \hat{\gamma}^{\mu}\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} = \gamma^0 \frac{\partial}{c\partial t} + \vec{\gamma}\frac{\partial}{\partial \vec{r}}. \tag{2}$$

Die Wechselwirkung zwischen Elektronen und dem elektromagnetischen Feld führen wir ein, in dem wir die Ableitung durch kovariante Ableitungen ersetzen

$$\partial_\mu \to \partial_\mu + i\frac{e}{\hbar c}A_\mu. \tag{3}$$

Wir werden den Spezialfall betrachten bei dem externe Felder zeitunabhängig sind. Dass bedeutet, dass wir nach Lösungen mit bestimmten Energien suchen können. Dementsprechend schreiben wir die Wellenfunktion $\Psi(t, \vec{r})$ als

$$\Psi(t, \vec{r}) = e^{-iEt/\hbar} \begin{pmatrix} \phi(\vec{r}) \\ \chi(\vec{r}) \end{pmatrix} \tag{4}$$

Wir schreiben die Dirac-Gleichung um als

$$\begin{pmatrix} E - eA_0 - mc^2 & \vec{\sigma} \cdot \left(ci\hbar\vec{\partial} + e\vec{A}\right) \\ -\vec{\sigma} \cdot \left(ci\hbar\vec{\partial} + e\vec{A}\right) & -(E - eA_0) - mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = 0. \tag{5}$$

Wir können diese Matrixgleichung durch zwei Gleichungen ersetzen

$$\left(E - mc^2 - eA_0\right)\phi = c\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \tfrac{e}{c}\vec{A}\right)\chi, \tag{6}$$

$$\left(E + mc^2 - eA_0\right)\chi = c\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \tfrac{e}{c}\vec{A}\right)\phi. \tag{7}$$

Wir betrachten jetzt die Lösungen mit positiven Energien und schreiben

$$E = mc^2 + \epsilon. \tag{8}$$

Im nicht-relativistischen Fall gilt

$$|\epsilon| \ll mc^2, \quad eA_0 \ll mc^2. \tag{9}$$

Es folgt aus Gl.(7) dass

$$\chi \sim \frac{p}{mc}\phi \sim \frac{v}{c}\phi \tag{10}$$

wobei v die Geschwindigkeit des Elektrons ist. Im nicht-relativistischen Fall ist die Geschwindigkeit des Elektrons viel kleiner als die Lichtgeschwindigkeit; dann gilt

$$\chi \ll \phi. \tag{11}$$

Wir entwickeln dann die Dirac-Gleichung in $\vec{p}/(mc), \epsilon/mc^2$ und χ/ϕ.

Wir drücken χ durch ϕ als

$$\chi = \frac{c\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)}{(E+mc^2-eA_0)}\phi, \tag{12}$$

entwickeln bis zur Ordnung v/c

$$\chi \approx \frac{c\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)}{2mc^2}\phi, \tag{13}$$

und ersetzen χ mit diesem Ausdruck in Gl.(6). Wir erhalten

$$(\epsilon - eA_0)\,\phi = \frac{\left[\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)\right]^2}{2m}\phi. \tag{14}$$

Wir wollen die rechte Seite von Gl.(14) vereinfachen. Dann schreiben wir

$$\begin{aligned}
&\left[\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)\right]^2 = \sigma_i\sigma_j\left(p_i-\frac{e}{c}A_i\right)\left(p_j-\frac{e}{c}A_j\right)\\
&= (\delta_{ij}+i\epsilon_{ijk}\sigma_k)\left(p_i-\frac{e}{c}A_i\right)\left(p_j-\frac{e}{c}A_j\right)\\
&= (\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^2 - i\frac{e}{c}\sigma_k\epsilon_{kij}\{p_i,A_j\} = (\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^2 - \frac{e\hbar}{c}\sigma_k\epsilon_{kij}\{\partial_i,A_j\}\\
&= (\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^2 - \frac{e\hbar}{c}\vec{\sigma}\cdot\left[\vec{\partial}\times\vec{A}\right] = (\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^2 - \frac{e\hbar}{c}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}.
\end{aligned} \tag{15}$$

Wir können jetzt die Gl.(14) umschreiben

$$\epsilon\phi = \left[\frac{(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m} + eA_0 - \mu\cdot B\right]\phi = H\phi \tag{16}$$

wobei

$$\vec{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma} = \frac{e\hbar}{mc}\frac{\vec{\sigma}}{2} = \frac{e\hbar}{mc}\vec{s}. \tag{17}$$

Die Gl.(16) ist die nicht-relativistische Pauli-Gleichung welche auch die Wechselwirkung des Spins des Elektrons mit dem magnetischen Feld beschreibt. Aus Gl.(17) sehen wir, dass das gyromagnetische Verhältnis des Elektrons

$$g_e = \frac{e\hbar}{mc} \tag{18}$$

direkt aus der Dirac-Gleichung folgt.

Wir haben gesehen, dass z.B. im Falle vom Wasserstoffatom Effekte der Feinstruktur eine wichtige Rolle spielen. Um diese Effekte zu beschreiben können wir versuchen, die Dirac-Gleichung weiter in v/c entwickeln. Um die Berechnung zu vereinfachen, betrachten wir den Spezialfall $A^\mu = (A_0, 0)$.

Wir betrachten dann Gl.(6) und Gl(7) und entwickeln in v/c. Obwohl das relativ einfach geht, müssen wir eine Kleinigkeit beachten. Diese Kleinigkeit ist die Normierung der Wellenfunktion. In der Tat, falls wir unsere nicht-relativistische Entwicklung durchführen, erhalten wir eine Schrödingergleichung bei der unser Spinor ϕ die Rolle einer Wellenfunktion spielt. Diese Wellenfunktion muss normiert sein. Wir haben aber auch die Relativistische Normierungsbedingung

$$\int \mathrm{d}^3\vec{r}\ \Psi^\dagger(t,\vec{r})\Psi(t,r) = 1. \tag{19}$$

Diese Bedingung bedeutet

$$1 = \int \mathrm{d}^3\vec{r}\left(\phi^\dagger\phi + \chi^\dagger\chi\right), \tag{20}$$

und weil

$$\chi = \frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{2mc}\phi, \tag{21}$$

erhalten wir

$$1 = \int \mathrm{d}^3\vec{r}\phi^\dagger\left(1 + \frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})^2}{4m^2c^2}\right)\phi = \int \mathrm{d}^3\vec{r}\ \phi^\dagger\left(1 + \frac{\vec{p}^2}{4m^2c^2}\right)\phi \tag{22}$$

Diese Gleichung bedeutet dass ϕ falsch normiert ist. Dementsprechend führen wir die neue Wellenfunktion ψ ein

$$\phi = (1 - \frac{\vec{p}^2}{8m^2c^2})\psi, \tag{23}$$

entwickeln bis zur zweiten Ordnung in v/c und erhalten

$$1 = \int \mathrm{d}^3\vec{r}\ \phi^\dagger\left(1 + \frac{\vec{p}^2}{4m^2c^2}\right)\phi \approx \int \mathrm{d}^3\vec{r}\ \psi^+\psi. \tag{24}$$

Um die Schreibweise zu vereinfachen, führen wir die potentielle Energie des Elektrons $U = eA_0$ ein und schreiben

$$
\begin{aligned}
(\epsilon - U)\phi &= c^2 \vec{\sigma}\cdot\vec{p}\frac{1}{2mc^2 + \epsilon - U}\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\phi = \frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})^2}{2m}\phi - \frac{(\sigma\cdot\vec{p})(\epsilon - U)(\sigma\cdot\vec{p})}{4m^2c^2}\phi \\
&= \left(1 - \frac{\epsilon}{2mc^2}\right)\frac{\vec{p}^2}{2m}\phi + \frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})U(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})}{4m^2c^2}\phi.
\end{aligned}
\tag{25}
$$

Wir setzen $\phi = (1 - \vec{p}^2/(8m^2c^2))\psi$ ein[1] und erhalten

$$
(\epsilon - U)\left(1 - \frac{\vec{p}^2}{8m^2c^2}\right)\psi = \frac{\vec{p}^2}{2m}\left(1 - \frac{\vec{p}^2}{8m^2c^2}\right)\psi - \frac{\epsilon\vec{p}^2}{4mc^2}\psi + \frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})U(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})}{4m^2c^2}\psi. \tag{26}
$$

Wir schreiben diese Gleichung um als

$$
\epsilon\left(1 + \frac{\vec{p}^2}{8m^2c^2}\right)\psi = \frac{\vec{p}^2}{2m}\psi + U\psi - U\frac{\vec{p}^2}{8m^2c^2}\psi - \frac{\vec{p}^4}{16m^3c^2}\psi + \frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})U(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})}{4m^2c^2}\psi. \tag{27}
$$

Wir multiplizieren die Gleichung mit dem *Operator* $(1 - \vec{p}^2/(8m^2c^2))$ von links, vernachlässigen alle Beiträge höherer Ordnung als v^2/c^2 und erhalten

$$
\epsilon\psi = \left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + U - \frac{\vec{p}^4}{8m^3c^2} - \{\frac{\vec{p}^2}{8m^2c^2}, U\} + \frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})U(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})}{4m^2c^2}\right]\psi = H\psi. \tag{28}
$$

Der Ausdruck in Klammern ist der korrekte Hamiltonoperator inklusive relativistischer Effekte bis zur Ordnung v^2/c^2.

Wir können den Hamiltonoperator ein bisschen vereinfachen. Es gilt

$$
-\{\frac{\vec{p}^2}{8m^2c^2}, U\} + \frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})U(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})}{4m^2c^2} = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\left(\vec{\nabla}^2 U\right) + \frac{\hbar}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\cdot\left[\vec{\nabla}U\times\vec{p}\right]. \tag{29}
$$

Wir erhalten

$$
\begin{aligned}
H &= \frac{\vec{p}^2}{2m} + U + \delta H, \\
\delta H &= -\frac{\vec{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\left(\vec{\nabla}^2 U\right) + \frac{\hbar}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\cdot\left[\vec{\nabla}U\times\vec{p}\right].
\end{aligned}
\tag{30}
$$

Der Operator δH beschreibt die Feinstruktur im Wasserstoffatom, die wir schon in Vorlesung 5 diskutiert haben. Damals haben wir diesen Operator mit qualitativer Begründung hingeschrieben; jetzt sehen wir wie dieser Operator aus der Dirac-Gleichung folgt.

[1] Beachten Sie dass wir das nur in führenden Termen machen sollen.