Dirac-Gl. für freies Teilchen, Lösungen:

Charakterisierung durch drei Quantenzahlen:

- $\underline{p}$ Impuls (kontinuierlich)
- Energie-Quantenzahl $\lambda = \pm 1$

$$E_\lambda(p) = \lambda\, c \sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}$$

(jeder davon ist zweifach entartet!)

- $m_s \; (\hat{=}\, \varepsilon) = \pm \frac{1}{2}$ Eigenwerte des Helizitätsoperators $\hat{\Lambda} = \hat{\underline{S}} \cdot \frac{\underline{p}}{p}$

Dirac-Spinoperator; Einheitsvektor in Impulsrichtung

Zu jedem E_+, E_- gibt es jeweils zwei Einstellmöglichkeiten des Spins bezgl. der Richtung von $\underline{p}$

$$[\hat{H}_D, \hat{\underline{p}}] = 0$$

$$[\hat{H}_D, \hat{\Lambda}] = 0, \quad [\hat{\Lambda}, \hat{\underline{p}}] = 0$$

$\Rightarrow$ vollständiger Satz kommutierender Observablen!

aufgepasst: $[\hat{H}_D, \hat{\underline{S}}] \neq 0$

$[\hat{H}_D, \hat{\underline{L}}] \neq 0$ aber $[\hat{H}_D, \underbrace{\hat{\underline{L}} + \hat{\underline{S}}}_{\text{Gesamtdrehimpuls}}] = 0$

Bahndrehimpuls (hier ohne Beweis)

$$\underline{\hat{J}} = \underline{\hat{L}} + \underline{\hat{S}}$$

Bemerkungen zum Energiespektrum

Wir haben gesehen: Wie auch bei der Klein-Gordon-Gl. gibt es bei der Dirac-Gl. Lösungen mit positiver und negativer Energie

$$\underset{\substack{= \\ \lambda}}{E_\pm} = \pm c \sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}$$

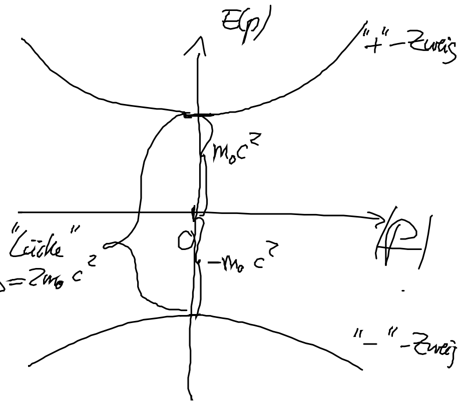


Illustration des "Energiespektrums"

Können wir die Lösungen mit negativer Energie ignorieren?

Eigentlich nicht, denn:

Ein beliebiger Spinor, der die Dirac-Gl. löst, ist Überlagerung der vier Basis-Spinoren und enthält damit i.A. auch Anteile mit negativer Energie!

Außerdem:

Selbst wenn der Anfangszustand ($t=0$) positive Energie hat, könnte es dann durch Wechselwirkung mit Strahlung Übergänge in Zustände mit negativer Energie geben
$\Leftrightarrow$ Atome (Moleküle) wären nicht stabil ... ?

Das wird aber nicht beobachtet!

"Erklärung" durch den Dirac-See

Im "Grundzustand" des Systems sind alle Zustände mit negativer Energie vollständig besetzt ("Dirac-See", Vakuumzustand)

Wegen des Pauli-Prinzips können Teilchen mit positiver Energie dann nicht in Zustände negativer Energie übergehen

(Pauli-Prinzip: Für Fermionen ($s=\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots$) kann jeder Zustand nur einfach besetzt werden!)

Was man aber beobachten kann:

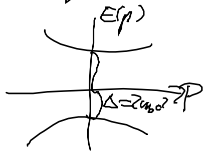
Durch ein Lichtquant (γ-Quant) mit Energie $\hbar\omega$, Impuls $\hbar\underbrace{k}_{p}$ kann man ein Elektron mit negativer Energie (und umgekehrter Ladung!) zusammen mit einem neuen "normalen" Elektron erzeugen

$$\gamma \to \underbrace{e^-}_{\substack{\text{„normale" Elektron mit} \\ \text{Energie } E_+ \\ \text{und negativer Ladung}}} + \underbrace{e^+}_{\substack{\text{Positron mit „positiver" Ladung} \\ \text{und Energie } |E_-| = E_+}}$$

Idee: Das γ-Quant schlägt ein "Loch" in den Dirac-See.
Der resultierende Zustand hat im Vergleich zum Grundzustand positive Ladung und positive Energie $\Rightarrow$ „Positron" („Antiteilchen" des Elektrons!)

Abschließende Bemerkungen

- Energiebilanz des Paarerzeugungsprozesses $\gamma \to e^- + e^+$ — $\hbar\omega$ muß mindestens gleich $2mc^2$ sein! ($\hbar\omega \geq \Delta = 2mc^2$)



- Man stellt an diesen Überlegungen: Dirac-Theorie ist eigentlich Vielteilchentheorie (Pauli-Prinzip wäre ansonsten irrelevant!)

  Adäquate Beschreibung gelingt erst nach Quantisierung des "Dirac-Feldes" (Quantenfeldtheorie)

- Will man an der Einteilcheninterpretation festhalten, so muß man sich auf den E_+-Zweig festlegen (und den E_--Zweig ignorieren!)

  (o.k., da Zustände mit positiver Energie nicht in E_--Zustände übergehen können!)
  Pauli-Prinzip

I.3. Nichtrelativist. Grenzfall

Motivation:

Wesentliche Phänomene aus dem Bereich der Spektroskopie (z.B. Spin-Bahn-Kopplung) können bereits im Rahmen einer Störungstheorie für relativist. Effekte verstanden werden!

Ausgangspunkt:

Dirac-Gl. im elektromagnetischen Feld

$\hat{=}$ in Anwesenheit der Potentiale $\underset{\text{skalares Potential}}{\Phi(\underline{r},t)}$, $\underset{\text{Vektorpotential}}{\underline{A}(\underline{r},t)}$

Ersetze dazu wie bei der Klein-Gordon-Gl. (und analog bei der Schrödingergl., klass. Hamilton-Mechanik)

$$\hat{\underline{p}} \to \hat{\underline{p}} - \frac{q}{c}\underline{A} \quad , \; q \text{ Ladung}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\Phi \qquad (\text{bzw. } H \to H - q\Phi)$$

$\Rightarrow$ Dirac-Gl. im elektromagnet. Feld

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underline{\psi} = \left(c\,\hat{\underline{\alpha}} \cdot \left(\hat{\underline{p}} - \frac{q}{c}\underline{A}\right) + \hat{\beta} m_0 c^2 + q\phi \right) \underline{\psi}} \quad (*)$$

Umschreiben von $(*)$:

- definiere dazu $\hat{\underline{\Pi}} = \hat{\underline{p}} - \frac{q}{c}\underline{A}$

- verwende für $\hat{\underline{\alpha}}, \hat{\beta}$ wieder die Standarddarstellung, also $\hat{\alpha}^i = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}^i \\ \hat{\sigma}^i & 0 \end{pmatrix}$

$\hat{\beta} = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix}$

- Ansatz für $\underline{\psi}$: $\underbrace{\underline{\psi}}_{\text{vierKomponentig}} = \begin{pmatrix} \underline{\varphi}_1 \\ \underline{\varphi}_2 \end{pmatrix}$ ← zweiKomponentige Vektoren

Einsetzen in $(*)$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \underline{\varphi}_1 \\ \underline{\varphi}_2 \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{\Pi}}\, \underline{\varphi}_2 \\ \hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{\Pi}}\, \underline{\varphi}_1 \end{pmatrix} + q\phi \begin{pmatrix} \underline{\varphi}_1 \\ \underline{\varphi}_2 \end{pmatrix} + m_0 c^2 \begin{pmatrix} \underline{\varphi}_1 \\ -\underline{\varphi}_2 \end{pmatrix}} \quad (**)$$

Dabei ist $\underbrace{\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{\Pi}}}_{2\times 2 \text{ Matrix}} = \hat{\sigma}^1 \hat{\Pi}_1 + \hat{\sigma}^2 \hat{\Pi}_2 + \hat{\sigma}^3 \hat{\Pi}_3$

<u>Ziel: Verständnis des nicht-relativistischen Grenzfalls</u>

Erinnerung: $\underline{\psi} \sim \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}E_+ t}}_{\text{Zeitabhängigkeit}}$

Idee: In diesem Grenzfall ist

$E' = E_+ - m_0 c^2$ klein

$= \underbrace{m_0 c^2 \sqrt{\frac{p^2}{m_0^2 c^2} + 1}}_{c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^4}} - m_0 c^2$

Annahme: $\frac{p^2}{m_0^2 c^2} \ll 1$

$\approx m_0 c^2 \left(1 + \frac{p^2}{2 m_0^2 c^2} + \dots \right) - m_0 c^2 \approx \frac{p^2}{2m_0}$

Wir spalten den Faktor $e^{-\frac{i}{\hbar}m_0c^2t}$ vom Zeitfaktor der Dirac-Lösung ab!

Schreibe also:
$$\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\end{pmatrix} = e^{-\frac{i}{\hbar}m_0c^2t}\begin{pmatrix}\tilde{\varphi}_1\\ \tilde{\varphi}_2\end{pmatrix} \quad \text{wobei } \tilde{\varphi}_1, \tilde{\varphi}_2 \sim e^{-\frac{i}{\hbar}E't}$$

Das ist analog zu unseren Überlegungen bei der Klein-Gordon-Gl.!

$\Rightarrow \tilde{\varphi}_1, \tilde{\varphi}_2$ variieren zeitlich vergleichsweise langsam!

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\varphi}_i = E'\tilde{\varphi}_i \ll m_0c^2\varphi_i$$
$(i=1,2)$

Setze dies in (**) und beachte:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi_i = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}m_0c^2t}\begin{pmatrix}\tilde{\varphi}_1\\ \tilde{\varphi}_2\end{pmatrix}\right)$$
$i=1,2$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}m_0c^2t}\, i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\tilde{\varphi}_1\\ \tilde{\varphi}_2\end{pmatrix} + m_0c^2\, e^{-\frac{i}{\hbar}m_0c^2t}\begin{pmatrix}\tilde{\varphi}_1\\ \tilde{\varphi}_2\end{pmatrix}$$

Produktregel

Man erhält:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\tilde{\varphi}_1\\ \tilde{\varphi}_2\end{pmatrix} = c\begin{pmatrix}\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{\Pi}}\,\tilde{\varphi}_2\\ \hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{\Pi}}\,\tilde{\varphi}_1\end{pmatrix} + q\phi\begin{pmatrix}\tilde{\varphi}_1\\ \tilde{\varphi}_2\end{pmatrix} - 2m_0c^2\begin{pmatrix}0\\ \tilde{\varphi}_2\end{pmatrix}} \quad (*)$$

Bis hierhin noch alles exakt!!

a) Einfachste Näherung, führt auf Herleitung der Pauli-Gleichung

Annahme: ~~Wir Nähern~~:
$$q\phi\,\tilde{\varphi}_2 \ll 2m_0c^2\,\tilde{\varphi}_2$$

Idee: Ruheenergie dominiert alles!

$$\underbrace{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\underline{\varphi}}_2} \ll 2m_0 c^2 \hat{\underline{\varphi}}_2$$

Näherung: Setze diese Terme zu Null !!

Die zweite Gleichung aus (*) vereinfacht sich zu

$$0 = c\, \hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{\Pi}}\, \hat{\underline{\varphi}}_1 - 2m_0 c^2 \hat{\underline{\varphi}}_2$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{\underline{\varphi}}_2 = \frac{\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{\Pi}}}{2m_0 c} \hat{\underline{\varphi}}_1}$$

Beachte $\hat{\underline{\Pi}} \sim \hat{\underline{p}} - \frac{q}{c}\underline{A}$ und $\hat{\underline{p}} \sim \underline{v}$ (Geschwindigkeit)

Die obige Gleichung impliziert also, dass $\hat{\underline{\varphi}}_2$ um einen Faktor $\frac{v}{c}$ kleiner ist als $\hat{\underline{\varphi}}_1$ ("$\hat{\underline{\varphi}}_2$ ist die langsamere Komponente")

Wir setzen nun das Ergebnis für $\hat{\underline{\varphi}}_2$ in die Gleichung ein, die sich (*) für $\hat{\underline{\varphi}}_1$ ergibt!

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\underline{\varphi}}_1 = \frac{(\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{\Pi}})^2}{2m_0} \hat{\underline{\varphi}}_1 + q\Phi \hat{1} \hat{\underline{\varphi}}_1}$$

Wir haben effektiv also nur noch eine Gleichung für den Zweiervektor $\hat{\underline{\varphi}}_1$ ("schnellere" Komponente des Spinors) erhalten!

Noch zu berechnen:

$(\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{\Pi}})^2$ mit $\hat{\underline{\Pi}} = \hat{\underline{p}} - \frac{q}{c}\underline{A}$

es gilt: $\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{\Pi}} = \hat{\sigma}^1 \hat{\Pi}_1 + \hat{\sigma}^2 \hat{\Pi}_2 + \hat{\sigma}^3 \hat{\Pi}_3 = \begin{pmatrix} \hat{\Pi}_3 & \hat{\Pi}_1 - i\hat{\Pi}_2 \\ \hat{\Pi}_1 + i\hat{\Pi}_2 & -\hat{\Pi}_3 \end{pmatrix}$

Man findet (hier ohne Beweis)

$$(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{\Pi}})^2 = \hat{\underline{\Pi}}^2\,\hat{1} + i\,\hat{\underline{\sigma}}\cdot(\hat{\underline{\Pi}}\times\hat{\underline{\Pi}})$$

mit $\hat{\underline{\Pi}}^2 = \hat{\Pi}_1^2 + \hat{\Pi}_2^2 + \hat{\Pi}_3^2$

und
$$\begin{aligned} i\hat{\underline{\sigma}}\cdot(\hat{\underline{\Pi}}\times\hat{\underline{\Pi}}) &= i\hat{\sigma}^1(\hat{\Pi}_2\hat{\Pi}_3 - \hat{\Pi}_3\hat{\Pi}_2) \\ &\quad - i\hat{\sigma}^2(\hat{\Pi}_3\hat{\Pi}_1 - \hat{\Pi}_1\hat{\Pi}_3) \\ &\quad + i\hat{\sigma}^3(\hat{\Pi}_1\hat{\Pi}_2 - \hat{\Pi}_2\hat{\Pi}_1) \\ &= i\hat{\sigma}^1[\hat{\Pi}_2,\hat{\Pi}_3] - i\hat{\sigma}^2[\hat{\Pi}_3,\hat{\Pi}_1] \\ &\quad + i\hat{\sigma}^3[\hat{\Pi}_1,\hat{\Pi}_2] \end{aligned}$$

(prüfe Vorzeichen $-i\hat{\sigma}^2 \to +i\hat{\sigma}^2$)

Einsetzen in die Gleichung für $\hat{\underline{\varphi}}_1$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\underline{\varphi}}_1 = \frac{1}{2m_0}\hat{\underline{\Pi}}^2\hat{\underline{\varphi}}_1 + \frac{i}{2m_0}\hat{\underline{\sigma}}\cdot(\hat{\underline{\Pi}}\times\hat{\underline{\Pi}})\hat{\underline{\varphi}}_1 + q\phi\,\hat{1}\,\hat{\underline{\varphi}}_1$$

$$\Leftrightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\underline{\varphi}}_1 = \underbrace{\left(\frac{1}{2m_0}\hat{\underline{\Pi}}^2 + q\phi\,\hat{1}\right)\hat{\underline{\varphi}}_1}_{\text{sieht schon aus wie bei der Schrödingergl. eines Teilchens im elektromagnet. Feld, nur dass } \hat{\underline{\varphi}}_1 \text{ Zweikomponentig}} + \underbrace{\frac{i}{2m_0}\hat{\underline{\sigma}}\cdot(\hat{\underline{\Pi}}\times\hat{\underline{\Pi}})\hat{\underline{\varphi}}_1}_{\text{„relativistische Korrektur"}}}$$