Dirac-Gleichung: Elektronen im elektromagnetischen Feld

Pflichtseminar Quantenmechanik
Prof. Georg Wolschin

Charles Möhl

9. Januar 2017

Betreuer: Dr. Elmar Bittner

Im Jahre 1927 stellte Dirac die nach ihm benannte Dirac-Gleichung als relativistische Erweiterung der Schrödinger-Gleichung von 1926 auf. Sie liefert die theoretische Begründung für den Spin und g-Faktor des Elektrons und sagt die Existenz von Antiteilchen voraus. Wir werden im folgenden aus der gekoppelten Dirac-Gleichung die Pauli-Gleichung sowie die Feinstruktur des H-Atoms herleiten und auf aktuelle Forschungsthemen eingehen.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

1.1 Geschichte

Bereits bei der Aufstellung seiner nichtrelativistischen Gleichung 1926 war Schrödinger bewusst, dass für den relativistischen Fall eines neuen Ansatzes bedürfen würde. Den ersten Versuch in diese Richtung machte er selbst noch im selben Jahr mit der „Klein-Gordon-Gleichung“, die allerdings keine korrekte Beschreibung für Elektronen lieferte, dem Hauptanliegen zur damaligen Zeit. Damit konnte das Ergebnis des Experiments von Stern und Gerlach aus dem Jahre 1922 weiterhin nur durch die heuristisch motivierte Pauli-Gleichung erklärt werden.

1.2 Wiederholung: Freie Dirac-Gleichung

Dirac fand 1927 mit der nach ihm benannten Gleichung (Gleichung 1) schließlich eine kovariante Version der Schrödinger-Gleichung, für deren Lösung vierkomponentige Wellenfunktionen, sog. „Bispinoren“ nötig waren, wobei die Operatoren vierdimensionale Matrizen sind.

$$i\hbar\partial_t\Psi = \underbrace{\left[c\vec{\alpha}\vec{p} + \beta mc^2\right]}_{H_D}\Psi \tag{1}$$

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \tag{2}$$

$$\alpha^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix} \tag{3}$$

Die Lösungen der freien Dirac-Gleichung haben dabei die Form von ebenen Wellen, wobei positive und negative Energien auftreten können.

$$\Psi_p^{(+)}{}_{1,2}(x) = \mathrm{e}^{-i(cp_0t-\vec{p}\vec{x})/\hbar} \cdot \begin{pmatrix} \chi_{1,2}^{(+)} \\ \frac{\vec{\sigma}\vec{p}\chi_{1,2}^{(+)}}{p_0+mc} \end{pmatrix} \quad \text{positive Energien} \tag{4}$$

$$\Psi_p^{(-)}{}_{1,2}(x) = \mathrm{e}^{i(cp_0t-\vec{p}\vec{x})/\hbar} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\vec{\sigma}\vec{p}\chi_{1,2}^{(-)}}{p_0+mc} \\ \chi_{1,2}^{(-)} \end{pmatrix} \quad \text{negative Energien} \tag{5}$$

1.3 Auswirkungen der Dirac-Theorie

Diracs Theorie bringt mehrere wichtige Implikationen mit sich. Zum einen gab sie eine theoretische Erklärung für den Spin und den anomalen g-Faktor des Elektrons. Außerdem lässt sich aus ihr die Feinstruktur des Wasserstoffatoms herleiten. Das zunächst rätselhafte Auftreten der negativen Energien war ein erster Hinweis auf die Existenz von Antiteilchen, was Dirac zunächst mit dem Modell des Dirac-See zu erklären versuchte.

2 Kopplung an das Elektromagnetische Feld

2.1 Minimale Kopplung

Die Kopplung an das elektromagnetische Feld kann mit der sogenannten „minimalen Kopplung“ erreicht werden, indem im Dirac-Hamilton-Operator H_D von Gleichung 1 der kanonische Impuls $\vec{p}$ durch den kinetischen Impuls $\vec{\pi}$ ersetzt wird und der Term für das elektrische Potential addiert wird. $\vec{A}$ bezeichnet dabei das Vektorpotential.

$$i\hbar\partial_t\Psi = \left[c\vec{\alpha}\underbrace{\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)}_{\vec{\pi}} + \beta mc^2 + e\phi\right]\Psi \tag{6}$$

Analog zur Betrachtung von freien Teilchen können wir die gekoppelte Dirac-Gleichung in Vierernotation darstellen unter Verwendung des Viererimpulses p_μ und des Viererpotentials A_μ, dessen nullte Komponente das elektrische Potential darstellt $A_0 = \varphi$:

$$0 = \left[-\gamma^\mu\left(i\hbar\partial_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right) + mc\right]\Psi \tag{7}$$

2.2 Eichinvarianz

Aufgrund der Eichsymmetrie der Maxwell-Gleichungen (siehe Gleichung 8) fordert man von der Dirac-Gleichung die Invarianz aller physikalischen Observablen unter Eichtransformationen mit einer beliebigen Skalaren Funktion des Ortes χ:

$$A'^\mu \to A^\mu - \partial^\mu\chi \tag{8}$$

Man kann leicht nachrechnen, dass die Invarianz aller Observablen durch eine lokale Eichtransformation der folgenden Form immer gewährleistet werden kann:

$$\Psi \to \Psi' = \Psi e^{i\Lambda(x)} \quad \text{mit} \quad \Lambda(x) = \frac{e}{\hbar c}\chi(x) \tag{9}$$

2.3 Kontinuitätsgleichung & Positivdefinitheit

Neben der Eichinvarianz fordern wir die Positivdefinitheit der Wahrscheinlichkeitsdichte sowie das Gelten eines Massenerhaltungsgesetzes in Form einer Kontinuitätsgleichung. Indem man einmal Ψ^+ von links an Gleichung 6 multipliziert und einmal die zu Gleichung 6 adjungierte Relation mit Ψ von rechts multipliziert erhält man zwei Gleichungen. Deren Substraktion voneinander liefert, zusammen mit den Identifikationen $\rho = \Psi^+\Psi$ und $\vec{j} = c\Psi^+\vec{\alpha}\Psi$, die Kontinuitätsgleichung:

$$\partial_t \rho(x) + \vec{\nabla}\vec{j}(x) = 0 \tag{10}$$

Aufgrund der Identifikation mit der aus der nichtrelativistischen Quantenmechanik bekannten Wahrscheinlichkeitsdichte ρ, als das vom Skalarprodukt induzierte Normquadrat ist automatisch die Positivdefinitheit der Dichte gewährleistet.

3 Nichtrelativistischer Grenzfall

Wir sind nun an den Lösungen zu positiven Energien im nichtrelativistischen Grenzfall interessiert. Da in diesem Fall nach Gleichung 4 die unteren beiden Einträge der Wellenfunktion (der sog. „kleinen Komponente“) um einen Faktor $\frac{v}{c}$ unterdrückt sind, wollen wir den Bispinor auftrennen. Außerdem machen wir einen Ansatz zur Abtrennung der Zeitentwicklung der Ruhemasse mc^2, im Vergleich derer die Zeitentwicklung der ungestrichenen Komponenten φ und χ als konstant angesehen werden kann:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \bar{\varphi} \\ \bar{\chi} \end{pmatrix} \tag{11} \qquad \begin{pmatrix} \bar{\varphi} \\ \bar{\chi} \end{pmatrix} = \mathrm{e}^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \tag{12}$$

Einsetzen des Ansatzes in Gleichung 6 liefert das folgende Gleichungssystem:

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \vec{\sigma}\vec{\pi}\chi \\ \vec{\sigma}\vec{\pi}\varphi \end{pmatrix} + e\phi \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} - 2mc^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix} \tag{13}$$

3.1 Pauli-Gleichung (1/c-Näherung)

Wenn wir nun in Gleichung 13 nur Terme bis zur Ordnung $\frac{1}{c}$ beachten, verschwindet die linke Seite sowie der Potentialterm auf der rechten Seite. Durch Umstellen der zweiten Zeile auf χ und anschließendem Einsetzen in die erste Zeile, erhalten wir eine geschlossene Gleichung für die „große Komponente“ φ:

$$i\hbar\partial_t\varphi = \left[\frac{1}{2m}(\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi})^2 + e\phi\right]\varphi \tag{14}$$

Unter Verwendung der Relation $(\vec{\sigma}\vec{\pi})^2 = \vec{\pi}^2 - \frac{e\hbar}{c}\vec{\sigma}\vec{B}$, welche aus der Relation für Pauli-Matrizen $\sigma^i\sigma^j = \delta_{ij} + i\epsilon^{ijk}\sigma^k$ folgt, ergibt sich die Pauli-Gleichung:

$$i\hbar\partial_t\varphi = \left[\frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}\vec{B} + e\phi\right]\varphi \tag{15}$$

3.2 Landé-Faktor

Für ein homogenes $\vec{B}$-Feld nimmt die Pauli-Gleichung folgende Gestalt an:

$$i\hbar\partial_t\varphi = \left[\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}\left(\vec{L} + 2\vec{S}\right)\vec{B} + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2 + e\phi\right]\varphi \tag{16}$$

Über Koeffizientenvergleich und aufgrund der linearen Addition der magnetischen Momente sieht man leicht, dass $g_s = 2$ gilt.

$$\vec{\mu}_s = g_s\frac{e}{2m_e}\cdot\frac{\vec{S}}{\hbar} \tag{17}$$

3.3 Korrekturterme des H-Atoms (rel., S.-B., Darwin)

Wir wollen nun in Gleichung 13 alle Terme, also bis zur Ordnung $\frac{1}{c^2}$ berücksichtigen. Da wir im Atom an gebundenen Zuständen interessiert sind, ersetzen wir analog zur stationären Schrödinger-Gleichung den Energieoperator $i\hbar\partial_t$ durch den Energieeigenwert ϵ. Analog zum Vorgehen vorher finden wir für die kleine Komponente:

$$\chi = \frac{1}{2mc}\cdot\frac{2mc^2}{\epsilon - e\phi + 2mc^2}\cdot\vec{\sigma}\vec{p}\varphi \approx \frac{1}{2mc}\left[1 - \frac{\epsilon - e\phi}{2mc^2}\right]\vec{\sigma}\vec{p}\varphi \tag{18}$$

Zusammen mit der Relation für Pauli-Matrizen $(\vec{\sigma}\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}\cdot\vec{b}) = (\vec{a}\cdot\vec{b})\mathbb{1} + i(\vec{a}\times\vec{b})\cdot\vec{\sigma}$ ergibt sich abermals eine geschlossene Gleichung für die große Komponente φ:

$$\epsilon\varphi = \left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + e\phi - \epsilon\frac{\vec{p}^2}{4m^2c^2} + \frac{1}{4m^2c^2}(\vec{\sigma}\vec{p})(e\phi)(\vec{\sigma}\vec{p})\right]\varphi \tag{19}$$

ϵ wird auf der rechten Seite durch Iteration von Gleichung 19 eliminiert und die oben genannte Relation für Pauli-Matrizen in Verbindung mit $\vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi$ erneut angewandt. Damit folgt:

$$\epsilon\varphi = \left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + e\phi - \frac{(\vec{p}^2)^2}{8m^3c^2} - \frac{\hbar e}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\left(\vec{E}\times\vec{p}\right) + \underbrace{\frac{i\hbar e}{4m^2c^2}\left(\vec{E}\cdot\vec{p}\right)}_{V_3}\right]\varphi \tag{20}$$

Da der Term V_3 nicht hermitesch ist, ersetzen wir ihn durch seinen hermiteschen Anteil:

$$\frac{V_3 + V_3^+}{2} = -\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\mathrm{div}\vec{E} \tag{21}$$

Damit können wir schließlich den Hamilton-Operator H für das Wasserstoffatom identifizieren, der die vollständige Feinstruktur enthält:

$$H = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m} + e\phi}_{H_0} \quad \underbrace{-\frac{(\vec{p}^2)^2}{8m^3c^2}}_{H_{relativistisch}} \quad \underbrace{-\frac{\hbar e}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\left(\vec{E}\times\vec{p}\right)}_{H_{Spin-Bahn}} \quad \underbrace{-\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\mathrm{div}\vec{E}}_{H_{Darwin}} \tag{22}$$

4 Aktuelle Forschung

4.1 Lamb-Shift

In Abschnitt 3.3 haben wir die Feinstruktur des Wasserstoffatoms aus der Dirac-Theorie hergeleitet. Ihr zufolge sind Energieniveaus zu gleichem totalen Drehimpuls J entartet. Tatsächlich ist aber beispielsweise die Entartung des $2S_{\frac{1}{2}}$- und $2P_{\frac{1}{2}}$-Niveau aufgehoben (siehe Abbildung 2). Nach der Quantenelektrodynamik (QED) sind die Hauptbeiträge Vakuumpolarisation (VP) und die Selbstenergie (SE). Während bei elektronischem Wasserstoff die Selbstenergie den Hauptbeitrag zum LAMB-Shift beiträgt, ist es beim myonischen die Vakuumpolarisation, vor allem aufgrund des um $\frac{m_e}{m_\mu}$ reduzierten BOHR-Radius. Außerdem ist der Beitrag der endlichen Kernausdehnung bei myonischem Wasserstoff mit etwa 2% um zwei Größenordnungen größer als bei elektronischem Wasserstoff.
Damit ist die Untersuchung des Lamb-Shifts bei myonischem Wasserstoff als Test der Quantenelektrodynamik von Interesse und ermöglicht außerdem die Bestimmung des Protonradius mit einer höheren Genauigkeit.

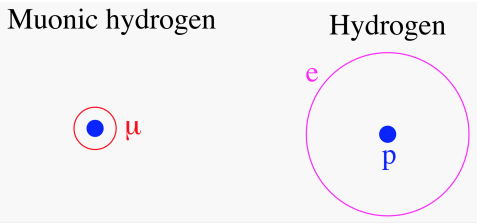

Abbildung 1: myonischer und elektronischer Wasserstoff; schematisch [1]

4.2 Laserspektroskopie: Bestimmung des Protonradius

Laut QED errechnet sich die Energiedifferenz zwischen $2S_{\frac{1}{2}}^{F=1}$ und $2P_{\frac{3}{2}}^{F=2}$ in Abhängigkeit des Protonradius r_p nach:

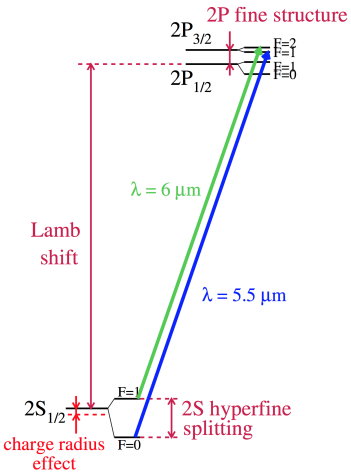

Abbildung 2: Gemessener Übergang [2]

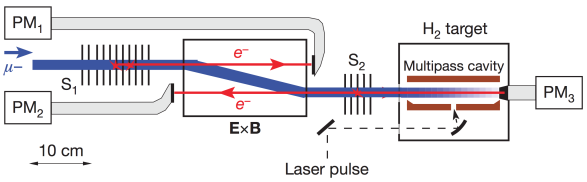

Abbildung 3: Versuchsaufbau [3]

$$\Delta\bar{E} = (209{,}9779(49) - 5{,}2262r_p^2 + 0{,}0347r_p^3)meV \tag{23}$$

Man kann diesen Übergang (siehe Abb. 2) experimentell vermessen. Dazu bestrahlt man ein Wasserstoff-Target mit Myonen um myonischen Wasserstoff zu produzieren, welcher anschließend mit einem verstimmbaren Laser um die Übergangsfrequenz angeregt wird (siehe Abb. 3). Dabei kann man eine Resonanzkurve aufnehmen (siehe Abb. 4), aus der sich die Übergangsfrequenz und daraus der Protonradius mit kleinem Fehler bestimmen lässt (siehe Abb. 5). Der so zunächst 2010 und 2013 erneut bestimmte Wert für den Protonradius weicht mit 6.7σ signifikant von allen vorhergehenden Messungen mit elektronischem Wasserstoff ab, die als „CODATA-2010“ zusammengefasst sind. Darin enthalten sind Ergebnisse aus Elektron-Proton-Streuexperimenten sowie der analog zur hier vorgestellten Laserspektroskopie an elektronischem Wasserstoff.

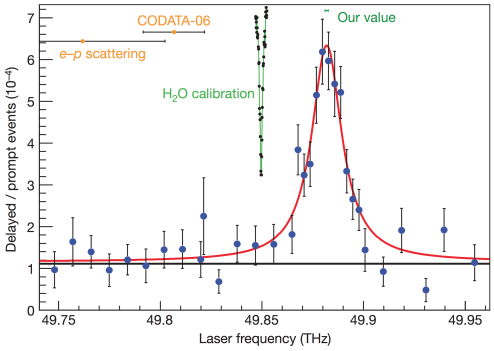

Abbildung 4: Resonanzkurve für myonischen Wasserstoff [3]

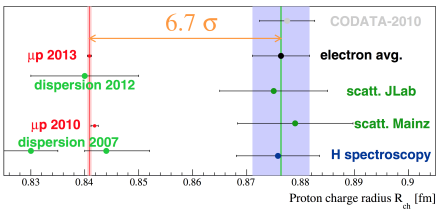

Abbildung 5: Vergleich der Ergebnisse für den Protonradius [2]

Diese als „Protonradius-Puzzle“ bezeichnete Diskrepanz ist bisher noch unverstanden. Mögliche Erklärungen könnten unerwartet hohe Beiträge zum Lamb-Shift nicht berücksichtigter

QED-Terme sein, wobei auch denkbar ist, dass der Protonradius in myonischem Wasserstoff tatsächlich vom elektronischen Wert abweicht.

5 Zusammenfassung

Die Dirac-Gleichung erweist sich als leistungsfähiges Mittel um unter anderem die Pauli-Gleichung, den g-Faktor des Elektrons und die Feinstrukturterme des Wasserstoffatoms herzuleiten. Außerdem war sie für die Entwicklung der theoretischen Physik zur damaligen Zeit von großer Bedeutung, unter anderem durch das Auftreten von negativen Energien. Dirac selbst versuchte dies zunächst durch das Konzept des „Dirac-See„ zu erklären, eine befriedigende Beschreibung lieferte später die Quantenelektrodynamik. Aber wie am "Protonradius-Puzzle" erkennbar, gibt es auch in der aktuellen Forschung ungeklärte Fragen.

6 Literatur

- Wolschin: Relativistische Quantenmechanik, Springer 2016
- Stepanow: Relativistische Quantentheorie, Springer 2010
- Schwabl: Quantenmechanik für Fortgeschrittene (QM II), Springer 2008
- Münster: Einführung in die Quantenfeldtheorie, WS11/12
- Pohl: Laser Spectroscopy of Muonic Hydrogen and the Puzzling Proton, Journal of the Physical Society of Japan, Issue 85, 2016
- Pohl et al: The size of the proton, Nature Vol. 466, 2010
- Antognini: The Lamb shift in muonic hydrogen, ETH Zürich 2011
- Bartelmann: Theoretische Physik, Springer 2015

Bildquellen

[1] A. Antognini. *The Lamb shift in myonic hydrogen.* Englisch. Präsentation. 31. März 2011.

[2] Randolf Pohl. „Laser Spectroscopy of Muonic Hydrogen and the Puzzling Proton". Englisch. In: *Journal of the Physical Society of Japan* (). URL: `http://journals.jps.jp/doi/10.7566/JPSJ.85.091003`.

[3] Aldo Antognini et. al. Randolf Pohl. „The size of the proton". Englisch. In: *nature* 466 (8. Juli 2010).