

QUANTEN UND RELATIVITÄT

EIN LEHRBUCH DER THEORETISCHEN PHYSIK

VON

PROF. DR. WILHELM MACKE

DIREKTOR DES INSTITUTS FÜR THEORETISCHE PHYSIK
AN DER TECHNISCHEN UNIVERSITÄT DRESDEN

ZWEITE, DURCHGESEHENE AUFLAGE
MIT 16 ABBILDUNGEN



LEIPZIG 1965

AKADEMISCHE VERLAGSGESELLSCHAFT
GEEST & PORTIG K.-G.

diese Größen willkürlich durch $\epsilon_0 = \hbar = c = 1$ ersetzt. Dies hat zur Folge, daß Energie, Masse und Frequenz wegen $E = mc^2 = \hbar\omega = \hbar ck$ die Dimension einer reziproken Länge erhalten (Wellenzahl k). Die Geschwindigkeit ist dimensionslos, wie c , desgleichen die Ladung $e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c = 1/137,04$. Multipliziert man dagegen jede Größe mit solchen Potenzen von ϵ_0 , \hbar und c , daß sie ihre übliche Dimension erhalten, so entsteht der gewünschte Zahlenwert im MKSA-System.

Für die Elementarladung zum Beispiel gilt $e = \sqrt{4\pi/137,04} \sqrt{\epsilon_0\hbar c} = 0,303 \sqrt{\epsilon_0\hbar c} = 1,602 \cdot 10^{-19}$ As. So werden alle Zuordnungen zu den üblichen Maßeinheiten eindeutig, ohne daß die Größen ϵ_0 , \hbar , c explizit in den Formeln auftreten. Hinsichtlich der Metrik des vierdimensionalen Raum-Zeit-Kontinuums sind die Konventionen $x_\mu^2 \equiv c^2 t^2 - r^2$ und $x_\mu^2 \equiv r^2 - c^2 t^2$ üblich. Hier wird der ersteren der Vorzug gegeben, weil auf diese Weise fast alle physikalisch interessanten Vierervektoren wie $p_\mu^2 = (mc)^2$ oder $d x_\mu^2 = c^2 dt^2$ positiv definit sind und alle physikalischen Gleichungen dadurch übersichtlicher werden. Um den Vergleich mit der anderen Metrik zu erleichtern, sind im Anhang [A 0] die wichtigsten Formeln der Theorie für beide Konventionen angegeben.

Das endgültige Manuskript und die Korrekturen wurden von meiner Frau und Mitarbeiterin Dipl.-Math. E. F. MACKE bearbeitet, der ich auch an dieser Stelle für die gehabte Mühe meinen besonders herzlichen Dank ausspreche. Ihr wie auch den Herren Dr. P. RENNERT, Dr. P. ZIESCHE, Dipl.-Phys. G. LEHMANN, B. PLETTRASS danke ich für zahlreiche interessante Hinweise und Anregungen sowie für sorgfältige Hilfe bei der Durchführung der Korrekturen, an der sich freundlicherweise auch die Herren Dr. R. LENK, Dr. B. PEGEL, Dipl.-Phys. G. BESSNER, G. DIENER, W. JOHN, H. WONN sowie K. GÜNTHER und G. KOSCH beteiligt haben. Der Akademischen Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G. und dem Leipziger Druckhaus sei für ihre aufgeschlossene Zusammenarbeit gedankt.

Dresden, den 1. März 1963

WILHELM MACKE

VORWORT ZUR ZWEITEN AUFLAGE

Der kurzfristig notwendig gewordene Nachdruck der ersten Auflage enthält als Anhang die mathematische Auswertung der in [284] bis [286] eingeführten Größen $\Sigma(p)$, $II(k^2)$ und $\Lambda_\mu(p', p)$. Darüber hinaus konnten die inzwischen bekanntgewordenen Druckfehler beseitigt und sonstige kleinere Verbesserungen durchgeführt werden.

Dresden, den 15. April 1964

WILHELM MACKE

INHALT

1	DIRACSCHE THEORIE DES ELEKTRONS	1
11	Klassisches, relativistisches Elektron	1
111	Bewegungsgleichung	2
112	LAGRANGESCHER FORMALISMUS	3
113	HAMILTONSCHER FORMALISMUS	4
12	Allgemeines Schema der Quantentheorie	7
121	Zustände und Wahrscheinlichkeiten	7
122	Eigenwerte und Erwartungswerte meßbarer Größen	11
123	Hermitisch konjugierte Operatoren und Matrizen	14
124	Nichtrelativistisches Elektron im elektromagnetischen Feld	17
13	Kräftefreies DIRACSCHEs Elektron	19
131	DIRACSCHE Matrixgleichung	20
132	Ruhenergiematrix	22
133	Geschwindigkeitsmatrizen	25
134	Spinnmatrizen	26
135	Pseudoskalare Matrix	31
136	Zusammenfassende Darstellung aller Matrizen	33
137	Stationäre Zustände freier DIRACTEILCHEN	35
138	Erwartungswerte der Geschwindigkeit	38
14	Einfluß elektromagnetischer Felder	40
141	KLEIN-GORDON-Gleichung	40
142	Vergleich mit der DIRACgleichung	44
143	SCHRODINGERgleichung und PAULIgleichung	45
144	Magnetisches Moment des Elektrons	47
145*	Zerlegung der DIRACgleichung in zweikomponentige Gleichungen	48
146*	Zerlegung bei Anwesenheit elektromagnetischer Felder	51
15	Erhaltungsgrößen und Quantenzahlen	54
151	Ladung und Stromdichte	55
152	Elektrisches und magnetisches Dipolmoment	56
153	Energie und Impuls	58
154	Drehimpuls und Spin	59
155	Spin-Bahn-Kopplung	60
156	Quantenzahlen und Spin-Bahn-Operator	62
16	Bewegung im Zentralfeld	65
161	Drehimpulseigenfunktionen	65
162	Separation der Drehimpulsanteile	69

27 Weitere Auswertung der Graphen 164

271 Berechnung der Funktionen D , und S 164

272 Invariante Darstellung der Funktionen G , D und S 166

273 Weitere invariante Ausbreitungsfunktionen 168

274 Berechnung der Spuren 162

275 FEYNMANSCHE Integrationsstricks 164

28 Behandlung der Divergenzen 168

281 Divergente Graphen und ihre Regularisierung 169

282 Vakuumgraphen 173

283 Geschlossene Elektronenlinien 176

284 Selbstbeeinflussung des Elektrons 177

285 Selbstbeeinflussung des Photons 181

286 Vertexgraphen 184

287 Renormierung von Masse und Ladung 186

288 Skeletgraphen mit Einfügungen 188

289 Abspaltung aller Divergenzen 193

3 Quantelung relativistischer Felder 199

31 Quantelung von Teilchensystemen 200

32 Erweiterung des Schemas auf Feldtheorien 202

33 Die Grundgleichungen der Quantenelektrodynamik 205

34 Freie Elektronen und Photonen 207

35 Berücksichtigung der LORENTZ-Konvention 210

36 Meßbare Größen und S -Matrix 211

37 Graphendarstellung der Matrixelemente 213

Anhang 217

A 0 Andere Wahl der Metrik 217

A 284 Auswertung von $\Sigma(p)$ 218

A 285 Auswertung von $\Pi(k^2)$ 221

A 286 Auswertung von $\Lambda_\mu(p', p)$ 223

Verzeichnis der verwendeten Formelzeichen 227

Sach- und Namenverzeichnis 231

Naturkonstanten 238

168 Radialteil beim Wasserstoffatom 71

164 Feinstruktur des Wasserstoffs 75

17 Weiterer Ausbau der Theorie 77

171 Mehrteilchenprobleme 77

172 DIRACSCHE Löchertheorie 80

2 Quantenelektrodynamik 83

21 Invariante Beschreibung der Elektronen 84

211 Zur relativistischen Schreibweise 84

212 Wellengleichungen 88

213 Unitäre Transformationen 91

214 Adjungierte DIRACGleichung 92

215 Invarianz gegenüber LORENTZTRANSFORMATIONEN 94

216 Vierkomponentige Darstellung der Ladungserhaltung 97

217 Magnetisierungsstrom 99

218 Erhaltung von Energie und Impuls 100

22 Mesonen und Photonen 101

221 Skalare Mesonen 101

222 Photonen 104

223 Energie, Impuls und Spin 107

23 Elektronen im elektromagnetischen Feld 110

231 Zeitablauf des Elektrons 110

232 Zeitabhängige Störungstheorie 113

233 S -Matrix und Interpretation der Störungstheorie 115

234 Potentialstreuung in erster Ordnung 118

24 Umwandlungsprozesse erster Ordnung 122

241 Positronentheorie und Paarerzeugung 122

242 Erzeugung und Vernichtung von Photonen 126

243 Die Effekte erster Ordnung 127

244 TSCHERENKOWEFFEKT 129

245 Photonemission gebundener Elektronen 132

25 Umwandlungsprozesse höherer Ordnung 133

251 Streuung mehrerer Elektronen 134

252 Virtuelle Photonen 134

253 Virtuelle Elektronen und Positronen 136

254 Die Effekte zweiter Ordnung 139

255 Allgemeines Graphenschema 141

26 Der COMPTONEFFEKT in zweiter Ordnung 145

261 Elementare Beschreibung 145

262 Auswertung der Graphen 147

263 Auswertung der Spur 149

264 Wirkungsquerschnitt 152

Dafür aber sind die Operatoren j_1^2 und j_2^2 mit (155.4) vertauschbar. Dies wurde mit der Darstellung (155.6) bereits in (155.8 und 9) bewiesen. Daher eignen sich die Quantenzahlen (5) auch für die Charakterisierung von Zuständen eines Elektrons mit Spin-Bahn-Kopplung. Das gleiche gilt für die Quantenzahlen (6). Der Übergang von den Quantenzahlen (2) und (4) auf (5) bzw. (6) hat somit den Vorteil, daß die letzteren auch bei Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung sinnvolle Quantenzahlen bleiben.

Nunmehr werden diese Überlegungen auf das DIRACSCHES Elektron ausgedehnt. Nach [134] gelten die Vertauschungsrelationen

$$[H, j_1^2]_- = 0 \quad [H, j_2^2]_- = 0 \quad [j_1^2, j_2^2]_- = 0. \quad (7)$$

Sie lassen sich auch auf ein Elektron im zentralsymmetrischen Feld mit $\mathcal{H} = 0$ und $U = U(r)$ ausdehnen, weil sowohl \hat{s} als auch l mit $U(r)$ vertauschbar sind. Ein Elektronenzustand kann daher durch die Quantenzahlen ℓ, j und m_j charakterisiert werden. Die entsprechend (5) noch fehlende Angabe über die Parallel- oder Antiparallelstellung kann durch l nicht erfolgen, da j^2 nicht mit H vertauschbar ist. Also könnte man versuchen, die Eigenwerte durch die Quantenzahlen (6) zu charakterisieren. Dabei allerdings wird sich herausstellen, daß nicht K' , sondern der durch

$$K = \beta K' = \beta \left(1 + \frac{2\hat{s}l}{\hbar^2} \right) = \beta \left(1 + \frac{\hat{\sigma}_1^2}{\hbar} \right) = \beta \left(\frac{1}{4} + \frac{j^2 - l^2}{\hbar^2} \right) \quad (8)$$

definierte „relativistische Spin-Bahn-Operator“ mit dem DIRACSCHEN HAMILTON-Operator vertauschbar ist. Er besitzt wegen

$$K^2 = \beta^2 K'^2 = (j + \frac{1}{2})^2 \quad (9)$$

die gleichen Eigenwerte wie K' in (155.12), wenngleich mit anderer Bedeutung. Trotzdem läßt sich auch hier die Deutung von $k = \pm |k|$ als Parallel- oder Antiparallelstellung von Spin und Bahn sinngemäß aufrechterhalten, weil die Erwartungswerte von K bei nichtrelativistischer Näherung in diejenigen von K' übergehen, denn es wird bei positiver Energie

$$\bar{K} \rightarrow \bar{K}' \quad \text{wegen} \quad \bar{\beta} = \sqrt{1 - (\bar{v}/c)^2} \rightarrow 1 \quad \text{für} \quad \bar{v}/c \rightarrow 0, \quad (10)$$

wie in (138.8) gezeigt wurde.

Der relativistische Spin-Bahn-Operator (8) erfüllt die Vertauschungsrelationen

$$[K, H]_- = 0 \quad [K, j^2]_- = 0 \quad [K, j_2]_- = 0. \quad (11)$$

Die erste von ihnen wird erst weiter unten in (162.8) bewiesen, weil dort der Beweis mit weniger Aufwand geführt werden kann. Die zweite und dritte Vertauschungsrelation von (11) folgen daraus, daß K bereits mit j vertauschbar ist. Dies wiederum folgt mit dem letzten Ausdruck von (8) daraus, daß j sowohl mit β und j^2 vertauschbar ist, als auch, wie in (155.8) gezeigt wurde, mit j^2 . Aus den

Gleichungen (7) und (11) folgt, daß die stationären Zustände des DIRACSCHEN Elektrons im Zentralfeld durch die Quantenzahlen

$$H, K, j_2 \rightarrow \ell, k, m_j \quad (12)$$

charakterisiert werden können. Die Angabe von j erübrigt sich, da sie in k enthalten ist.

16 Bewegung im Zentralfeld

Zusammenfassung: Die stationären, durch $H\psi = E\psi$ gegebenen Zustände eines Elektrons im Zentralfeld werden berechnet. Zunächst werden die Eigenlösungen von j^2 und l_2 durch Linearkombinationen aus denen von l^2, l_2 und \hat{s}_2 aufgebaut. Sie sind gleichzeitig Eigenfunktionen des nichtrelativistischen Spin-Bahn-Operators $K' = 1 + \hat{\sigma}_1^2/\hbar$. Die Eigenfunktionen von $K = \beta K'$ und schließlich von H folgen aus ihnen durch entsprechende Erweiterung. Die Eigenwertgleichung wird so zu einem System von zwei Bestimmungsgleichungen für zwei radiale Eigenfunktionen $f(r)$ und $g(r)$. Die Normierungsforderung für diese Lösungen endlich beschränkt die möglichen Energien E auf ein diskretes Spektrum. Im Feld $U = -e/4\pi\epsilon_0 r$ entsteht die SOMMERFELDSCHES Formel für die Feinstruktur der Wasserstoffterme.

161 Drehimpulseigenfunktionen

Das Ziel der Untersuchungen dieses Kapitels besteht darin, die stationären Eigenzustände und die zugehörigen Eigenwerte der Energie für ein DIRACSCHES Elektron zu berechnen, das sich im zentralsymmetrischen skalaren Feld $U(r)$ bewegt. Diese streng relativistische Beschreibung wird durch die Gleichungen

$$H\psi = E\psi \quad H = eU(r) + mc^2\beta + c\hat{\alpha}\hat{p} \quad (1)$$

wiedergegeben. Nach (156.7 und 11) sind H, j_2 und K drei untereinander vertauschbare Operatoren. Die Eigenlösungen ψ von (1) können daher als Eigenfunktionen dieser drei Operatoren aufgesucht werden. Um dieses Ziel systematisch zu erreichen, gehen wir schrittweise vor und betrachten erst die Eigenlösungen von \hat{s}_2 und l_2 , um daraus diejenigen von j_2 zu bestimmen. Aus diesen werden die Eigenlösungen von K' und die von K aufgebaut. Durch systematische Erweiterung werden hieraus schließlich die Eigenlösungen ψ von H gewonnen.

Eigenlösungen für den Bahndrehimpuls eines Teilchens sind die wohlbekanntesten normierten Kugelfunktionen (Q 433.20)

$${}^l Y_{l, m_l} = \hbar^{1/2} l(l+1) Y_{l, m_l} \quad {}^l Y_{l, m_l} = \hbar m_l Y_{l, m_l}. \quad (2)$$

Die Eigenlösungen von \hat{s}_2 sind durch die Gleichungen

$$\hat{s}_2 \chi_{m_s} = \hbar m_s \chi_{m_s} \quad \hat{s}_2 = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \quad m_s = \pm 1/2 \quad (3)$$

gegeben. Als Matrixdarstellung kann

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

gewählt werden.

Die Produkte der Funktionen (2) und (3)

$$\chi = \chi_{m_s} Y_{l, m_l} \quad i_z \chi = \hbar(m_l + m_s) \chi \equiv \hbar m \chi \quad (5)$$

sind Eigenfunktionen von i^2 , i_z und i_x , nicht aber von j^2 , da i_x und \hat{s}_z nicht einzeln mit j^2 vertauschbar sind.

Eigenfunktionen zu j^2 , i_z und i^2 , \hat{s}^2 und nach (155.6 und 12) daher auch zum nichtrelativistischen Spin-Bahn-Operator K' können aus ihnen als Linearkombination konstruiert werden:

$$\boxed{K' \chi_{k m} = k \chi_{k m} \quad \chi_{k m} = A \chi_+ Y_{l, m-1/2} + B \chi_- Y_{l, m+1/2} \quad (6)}$$

$$k = \pm |k| = \pm (j + 1/2) \quad (\chi_{k m}, \chi_{k' m'}) = \delta_{k k'} \delta_{m m'}$$

Weitere Funktionen können hier nicht auftreten, da nur die zu $m_l = m \mp 1/2$ und $m_s = \pm 1/2$ gehörigen Funktionen den gleichen Eigenwert m von i_z besitzen. Die Koeffizienten A und B müssen so bestimmt werden, daß sie der Eigenwertgleichung (6) und der Normierungsbedingung genügen. Die Komponentenzerlegung des Spin-Bahn-Operators

$$K' = 1 + \frac{\sigma_1'}{\hbar} = 1 + \frac{\sigma_x i_x + \sigma_y i_y}{\hbar} \quad (7)$$

erfolgt unter Verwendung der Relation $\sigma_y = i \sigma_x \sigma_z$ von (134.10). Bei Anwendung auf die Spin-Eigenfunktion (3) entsteht mit $\sigma_x \chi_{\pm} = \chi_{\mp}$ von (134.33)

$$K' \chi_{\pm} = \left(1 \pm \frac{i_x}{\hbar}\right) \chi_{\pm} + \frac{(i_x \pm i_y)}{\hbar} \chi_{\mp} \quad (8)$$

und bei weiterer Anwendung auf die Kugelfunktion Y_{l, m_l}

$$K' \chi_{\pm} Y_{l, m_l} = (1 \pm m_l) \chi_{\pm} Y_{l, m_l} + \sqrt{l(l+1) - m_l(m_l \pm 1)} \chi_{\mp} Y_{l, m_l \pm 1} \quad (9)$$

Diese Umformung ist aus der nichtrelativistischen Quantentheorie (Q 432.16) bekannt. Bei den Funktionen (6) besitzt die Quantenzahl m_l des Bahndrehimpulses die Werte

$$m_l = m \mp 1/2 \quad 1 \pm m_l = 1/2 \pm m \quad m_l(m_l \pm 1) = m^2 - (1/2)^2 \quad (10)$$

Bei Anwendung des Spin-Bahn-Operators auf eine der Funktionen (6) entsteht somit

$$K' \chi_{\pm} Y_{l, m \mp 1/2} = (1/2 \pm m) \chi_{\pm} Y_{l, m \mp 1/2} + \sqrt{l(l+1/2)^2 - m^2} \chi_{\mp} Y_{l, m \pm 1/2} \quad (11)$$

Nunmehr geht die Eigenwertgleichung (6) für den kombinierten Ansatz in ein System von Bestimmungsgleichungen für A und B über:

$$\begin{aligned} (1/2 + m) A + \sqrt{l(l+1/2)^2 - m^2} B &= k A \\ (1/2 - m) B + \sqrt{l(l+1/2)^2 - m^2} A &= k B. \end{aligned} \quad (12)$$

Für das Verhältnis der beiden Koeffizienten erhalten wir

$$\frac{B}{A} = \frac{k - 1/2 - m}{\sqrt{l(l+1/2)^2 - m^2}} = \frac{\sqrt{l(l+1/2)^2 - m^2}}{k - 1/2 + m} \quad (k - 1/2)^2 = (l + 1/2)^2 \quad (13)$$

Die letzte Gleichung folgt aus dem zweiten Gleichheitszeichen und besagt mit $k = \pm (j + 1/2)$ aus (6)

$$(\pm (j + 1/2) - 1/2)^2 \equiv (j + 1/2 \mp 1/2)^2 = (l + 1/2)^2 \quad \boxed{j = l \pm 1/2}, \quad (14)$$

daß also, wie bereits in [155] angegeben wurde, aus Zuständen l und $s = 1/2$ nur solche mit $j = l \pm 1/2$ gebildet werden können. Außerdem vereinfacht sich das Verhältnis B/A :

$$\frac{B}{A} = \sqrt{\frac{k - 1/2 - m}{k - 1/2 + m}} \quad 1 = A^2 + B^2 \quad (15)$$

Zusammen mit der danebenstehenden Normierungsbedingung wird zunächst A aus

$$\frac{1}{A^2} = 1 + \left(\frac{B}{A}\right)^2 = 1 + \frac{k - 1/2 - m}{k - 1/2 + m} = \frac{2k - 1}{k - 1/2 + m} \quad (16)$$

bestimmt. Die Multiplikation mit der ersten Gleichung (15) ergibt B , und es entsteht endgültig für positive und negative k

$$\boxed{\chi_{k, m} = \sqrt{\frac{k - 1/2 + m}{2k - 1}} \chi_+ Y_{l, m-1/2} + \sqrt{\frac{k - 1/2 - m}{2k - 1}} \chi_- Y_{l, m+1/2}} \quad (17)$$

für die Eigenfunktion des Spin-Bahn-Operators K' .

Für die nachfolgenden Überlegungen werden die weiteren Beziehungen

$$\boxed{e \equiv \tau/r \quad (\sigma e)^2 = 1 \quad [\sigma e, K']_+ = 0 \quad [\sigma e, j]_- = 0} \quad (18)$$

vorausgesetzt. In der ersten wird der zu r gehörige radiale Einheitsvektor definiert. Die übrigen drei werden am Schluß des Abschnitts bewiesen. Mit den Gleichungen (18) kann gezeigt werden, daß die mit σe multiplizierte Eigenfunktion $\chi_{k, m}$ die Eigenschaften

$$\begin{aligned} K' \sigma e \chi_{k, m} &= -\sigma e K' \chi_{k, m} = -k \sigma e \chi_{k, m} \\ e_z j \sigma e \chi_{k, m} &= \sigma e \circ e_z j \chi_{k, m} = \hbar m \sigma e \chi_{k, m} \end{aligned} \quad (19)$$

besitzt. Durch Hinzufügen von σe entsteht also die Eigenfunktion

$$\sigma e \chi_{k, m} = \chi_{-k, m}, \quad \chi_{-k, m} = 1. \quad (20)$$

Sie ist ebenfalls normiert, wie sich beim Einsetzen und Berücksichtigen der Hermitizität von $\vec{\sigma}e$ herausstellt.

Die stationären Zustände des DIRACSCHEN Elektrons im Zentralfeld aber sind nach (156.11) keine Eigenzustände von K' , sondern vom relativistischen Spin-Bahn-Operator

$$K = K'\beta = \beta K' \quad K, K', \beta \rightarrow k, k', \varepsilon. \quad (21)$$

K, K' und β sind miteinander vertauschbare Operatoren, die unabhängig voneinander die Eigenwerte k , (hier:) k' und ε besitzen. Daher erhalten wir mit dem Produktansatz

$$\varphi_{k,m} = \eta_e \chi_{k',m} \quad K \varphi_{k,m} = k \varphi_{k,m} \quad k = \varepsilon k' \quad (22)$$

bereits eine Eigenfunktion zu K . Allerdings führen die beiden Funktionen mit $\varepsilon = +1, k' = +k$ und $\varepsilon = -1, k' = -k$ zum gleichen Eigenwert k . Daher ist die aus diesen beiden Lösungen zusammengesetzte Funktion

$$\varphi_{k,m} = A \eta_+ \chi_{k,m} + B \eta_- \chi_{-k,m} \quad (23)$$

ebenfalls eine Eigenfunktion zu K . Die Anwendung von K auf (22) führt nämlich zunächst auf

$$K \varphi_{k,m} = K'(A \eta_+ \chi_{k,m} - B \eta_- \chi_{-k,m}) \quad (24)$$

und dann direkt auf $k \varphi_{k,m}$.

Abschließend sollen die Relationen (18) bewiesen werden. Mit Hilfe der von (134.13) her bekannten Formel

$$\vec{\sigma} \mathfrak{A} \circ \vec{\sigma} \mathfrak{B} = \mathfrak{A} \mathfrak{B} + i \vec{\sigma} (\mathfrak{A} \times \mathfrak{B}) \quad (25)$$

bilden wir

$$\vec{\sigma} \mathfrak{r} \circ \vec{\sigma} \mathfrak{r} = \mathfrak{r}^2. \quad (26)$$

Damit ist die zweite Gleichung (18) bewiesen. Um die dritte zu beweisen, beachten wir zunächst

$$\vec{\sigma} \mathfrak{r} \circ \vec{\sigma} \mathfrak{l} = \mathfrak{r} \mathfrak{l} + i \vec{\sigma} (\mathfrak{r} \times \mathfrak{l}) = i \vec{\sigma} [\mathfrak{r} \times (\mathfrak{r} \times \mathfrak{p})]. \quad (27)$$

Die zugehörige Antivertauschung liefert

$$[\vec{\sigma} \mathfrak{r} \circ \vec{\sigma} \mathfrak{l}]_+ = \mathfrak{r} \mathfrak{l} + \mathfrak{l} \mathfrak{r} + i \vec{\sigma} (\mathfrak{r} \times \mathfrak{l} + \mathfrak{l} \times \mathfrak{r}) = -2 \vec{\sigma} \mathfrak{r} \mathfrak{h}, \quad (28)$$

weil

$$\mathfrak{r} \mathfrak{l} = \mathfrak{r} (\mathfrak{r} \times \mathfrak{p}) = 0 \quad \mathfrak{l} \mathfrak{r} = (\mathfrak{r} \times \mathfrak{p}) \mathfrak{r} = 0 \quad (29)$$

gilt, sowie

$$\begin{aligned} \mathfrak{r} \times \mathfrak{l} + \mathfrak{l} \times \mathfrak{r} &= \mathfrak{r} \times (\mathfrak{r} \times \mathfrak{p}) + (\mathfrak{r} \times \mathfrak{p}) \times \mathfrak{r} \\ &= \mathfrak{r} \circ [\mathfrak{r}, \mathfrak{p}] - \mathfrak{r} [\mathfrak{r} \circ \mathfrak{p}] = -\mathfrak{r} (\mathfrak{B} - \mathfrak{I}) \mathfrak{h} / i = -2 \mathfrak{r} \mathfrak{h} / i. \end{aligned} \quad (30)$$

Hierbei wiederum wurde (122.8) berücksichtigt. Mit $[\mathfrak{r}, \mathfrak{p}]$ ist das entsprechende skalare Produkt gemeint. Nunmehr folgt aus (28) direkt

$$[\vec{\sigma} \mathfrak{r}, K']_+ = [\vec{\sigma} \mathfrak{r}, \mathfrak{l} + \vec{\sigma} \mathfrak{l} / \mathfrak{h}]_+ = 2 \vec{\sigma} \mathfrak{r} - 2 \vec{\sigma} \mathfrak{r} = 0 \quad (31)$$

und damit die dritte Gleichung von (18). Der Faktor r , um den sich (31) von (18) unterscheidet, spielt keine Rolle, da K' und \mathfrak{l} nur auf die Winkel, nicht aber auf den Betrag r operieren. Die letzte Gleichung von (18) schließlic wird durch

$$\begin{aligned} [j \circ \vec{\sigma} \mathfrak{r}]_- &= [j \circ \vec{\sigma} \mathfrak{r}]_+ + \frac{\hbar}{2} [\vec{\sigma} \circ \vec{\sigma} \mathfrak{r}]_- \\ &= \mathfrak{r} \times [\mathfrak{p} \circ \mathfrak{r}]_- \vec{\sigma} + \frac{\hbar}{2} [\vec{\sigma} \circ \vec{\sigma}]_- \mathfrak{r} = \frac{\hbar}{i} \mathfrak{r} \times \vec{\sigma} - \hbar i \vec{\sigma} \times \mathfrak{r} = 0 \end{aligned} \quad (32)$$

bewiesen. Die hier verwendete Beziehung

$$[\vec{\sigma} \circ \vec{\sigma}]_- \mathfrak{r} = -2i \vec{\sigma} \times \mathfrak{r} \quad (33)$$

folgt aus (134.11).

162 Separation der Drehimpulsanteile

Die gesuchten stationären Zustände der DIRACGLEICHUNG werden nach (161.1) durch die Gleichungen

$$\boxed{H \psi = E \psi} \quad H = e U(r) + m c^2 \beta + c \vec{\alpha} \mathfrak{p} \quad (1)$$

beschrieben. Wir führen zunächst mit

$$e = \mathfrak{r} / r \quad \vec{\alpha} = \tau \vec{\sigma} \quad \mathfrak{s} = \hbar \vec{\sigma} / 2 \quad (2)$$

den radialen Einheitsvektor e und die Spinmatrix $\vec{\sigma}$ ein. In der nichtrelativistischen Theorie [Q 431] erfolgt die Separation der Winkelanteile im allgemeinen dadurch, daß man den in der kinetischen Energie auftretenden Impulsoperator entsprechend

$$\mathfrak{p} = e \circ e \mathfrak{p} - e \times (e \times \mathfrak{p}) \quad (3)$$

zerlegt und die dabei entstehenden Terme durch die hermiteschen Operatoren

$$\mathfrak{p}_r = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) = e \mathfrak{p} + \frac{\hbar}{i r} \quad \text{und} \quad \mathfrak{l} = \mathfrak{r} \times \mathfrak{p} \quad (4)$$

darstellt.

Bei der DIRACGLEICHUNG wird der gleiche Weg beschritten. Er führt zu der Zerlegung

$$\begin{aligned} \vec{\sigma} \mathfrak{p} &= \vec{\sigma} e \circ e \mathfrak{p} - \vec{\sigma} (e \times \mathfrak{p} - \frac{\mathfrak{l}}{r}) = \vec{\sigma} e \left(\mathfrak{p}_r - \frac{\hbar}{i r} + \frac{i \vec{\sigma} \mathfrak{l}}{r} \right) \\ &= \vec{\sigma} e \left[\mathfrak{p}_r - \frac{\hbar}{i r} \left(1 + \frac{2 \mathfrak{s} \mathfrak{l}}{\hbar^2} \right) \right] = \vec{\sigma} e \left(\mathfrak{p}_r - \frac{\hbar}{i r} \beta K \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Der erste Ausdruck entsteht unter Verwendung von (3). Beim zweiten wurden (4) und die Beziehung (161.27) verwendet. Die Einführung des Spindrehimpulses \mathfrak{s} läßt erkennen, daß hier der Spin-Bahn-Operator $K' = \beta K$ eingeführt werden kann. Der HAMILTONOPERATOR (1) erhält mit (2) und (5) die für den vorliegenden

Zweck einfachere Form

$$H = eU(r) + mc^2\beta + c\tau\vec{\sigma}e\left(p_r - \frac{\hbar}{ir}\beta K\right), \quad (6)$$

in der nur noch die Anteile $\vec{\sigma}e$ und K richtungsabhängig sind.

Um jetzt den bei (156.11) ausgelassenen Beweis der **Vertauschbarkeit von H und K** nachzuholen, beachten wir zunächst die Gültigkeit der Vertauschungsrelationen

$$[\vec{\sigma}e, K]_{\pm} = 0 \quad [\tau, K]_{\pm} = 0 \quad [\beta, K]_{\pm} = 0. \quad (7)$$

Die erste von ihnen folgt aus (161.18 und 21), wenn man beachtet, daß der hier wegen $K = \beta K'$ noch auftretende Faktor β mit $\vec{\sigma}e$ vertauschbar ist und daher aus der Vertauschungsklammer herausgezogen werden kann. Die zweite und dritte Relation (7) folgen aus dem Auftreten von β in K sowie daraus, daß τ und β mit K' in $K = \beta K'$ vertauschbar sind. Nunmehr betrachten wir die Vertauschung des HAMILTONOPERATORS H in der Form (6) mit dem Spin-Bahnoperator K . Da die ersten beiden Terme von (6) mit K vertauschbar sind, reduziert sich die Vertauschung auf

$$[H, K]_{-} = \left[c\tau\vec{\sigma}e\left(p_r - \frac{\hbar}{ir}\beta K\right), K \right]_{-} = [\tau\vec{\sigma}e, K]_{-} c\left(p_r - \frac{\hbar}{ir}\beta K\right) = 0. \quad (8)$$

Im zweiten Ausdruck konnte ein Faktor aus der Vertauschungsklammer herausgezogen werden, der wegen (7) und $[p_r, \hat{s}]_{-} = 0$ ohnehin mit K vertauschbar ist. Die verbliebene Vertauschung aber verschwindet wegen (7), weil sie in

$$[\tau\vec{\sigma}e, K]_{-} = \{\tau[\vec{\sigma}e, K]_{+} - [\tau, K]_{+}\vec{\sigma}e\} \quad (9)$$

zerlegt werden kann. Damit ist die in (156.11) behauptete Vertauschbarkeit von H und K nachträglich bewiesen.

Beim Einsetzen des umgeformten HAMILTONOPERATORS (6) in die Eigenwertgleichung (1) kann K durch k ersetzt werden, da ψ als Eigenfunktion von K vorausgesetzt wird. Anschließend wird im letzten Term von (6) der Faktor $\tau\vec{\sigma}e$ nach rechts durchgetauscht. Ersetzen wir schließlich die Wellenfunktion durch

$$\psi = \frac{1}{r}\varphi \quad \text{mit} \quad p_r\psi = \frac{1}{r}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r}\varphi\right), \quad (10)$$

so lautet die neue Eigenwertgleichung für φ

$$E\varphi = \left[eU(r) + mc^2\beta + \frac{\hbar c}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\beta k}{r}\right)\tau\vec{\sigma}e \right]\varphi. \quad (11)$$

Die Wellenfunktion φ von (11) muß genau wie die ebenfalls mit φ bezeichnete Eigenfunktion (161.22) eine Eigenfunktion der Operatoren K und j_z sein. Wir machen für φ einen Ansatz, der aus (161.23) durch das Hinzufügen **r -abhängiger**

Funktionen entsteht, denn auch die durch

$$\varphi_{k,m} = f(r)\eta_{+}\chi_{k,m} + ig(r)\eta_{-}\chi_{-k,m} \quad (12)$$

angesetzte Funktion ist nach wie vor eine Eigenfunktion von K und j_z . In der Wellengleichung (11) tritt wegen (161.20) der Ausdruck

$$\tau\vec{\sigma}e\varphi_{k,m} = \tau[f(r)\eta_{+}\chi_{-k,m} + ig(r)\eta_{-}\chi_{k,m}] = f(r)\eta_{-}\chi_{-k,m} + ig(r)\eta_{+}\chi_{k,m} \quad (13)$$

auf. Er geht aus φ offenbar durch Vertauschung der Radialteile $f(r)$ und $ig(r)$ hervor. Nach Einsetzen von (12) in (11) und anschließendem Koeffizientenvergleich entstehen die Bestimmungsgleichungen

$$\begin{aligned} (eU + mc^2 - E)f(r) + \frac{\hbar c}{i}\left(\frac{d}{dr} + \frac{k}{r}\right)ig(r) &= 0 \\ (eU - mc^2 - E)ig(r) + \frac{\hbar c}{i}\left(\frac{d}{dr} - \frac{k}{r}\right)f(r) &= 0. \end{aligned} \quad (14)$$

für $f(r)$ und $g(r)$. Sie werden im nächsten Abschnitt genauer untersucht. Die Normierungsbedingung der Wellenfunktion lautet

$$\int d\tau\psi^{\dagger}\psi = \int d\Omega\chi_{k,m}^{\dagger}\chi_{k,m}\int dr(|f(r)|^2 + |g(r)|^2) = 1. \quad (15)$$

Da die Drehimpulseigenfunktionen bereits normiert sind, folgt

$$\int dr|f(r)|^2 + \int dr|g(r)|^2 = 1 \quad (16)$$

als Normierungsbedingung für die radialen Eigenfunktionen.

163 Radialteil beim Wasserstoffatom

Der Radialteil der DIRACGLEICHUNG enthält nunmehr zwei Funktionen $f(r)$ und $g(r)$, die durch das Gleichungssystem (162.14) und die Normierungsbedingung (162.16) bestimmt werden müssen. Wir berechnen speziell die Eigenzustände des Elektrons im Wasserstoffatom und führen neben dem COULOMB-POTENTIAL die Abkürzungen

$$U = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0 r} \quad \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \equiv \alpha \quad \frac{mc^2 \pm E}{\hbar c} \equiv \frac{1}{a_{\pm}} \quad (17)$$

ein, daneben noch für späteren Gebrauch die Konstante

$$a \equiv \sqrt{a_{+}a_{-}} = \frac{\hbar c}{\sqrt{(mc^2)^2 - E^2}}. \quad (18)$$

Die radialen Gleichungen (162.14) gehen jetzt in die Gleichungen

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{a_-} - \frac{\alpha}{r}\right) f + \left(\frac{d}{dr} + \frac{k}{r}\right) g = 0 \\ \left(\frac{1}{a_+} + \frac{\alpha}{r}\right) g + \left(\frac{d}{dr} - \frac{k}{r}\right) f = 0 \end{cases} \quad (3)$$

über. Aus diesen Gleichungen ist der in a_+ und a_- enthaltene Eigenwert der Energie E in Abhängigkeit von der Quantenzahl k zu bestimmen.

Zunächst wird das Verhalten der Wellenfunktion für große r untersucht. Die Gleichungen (3) gehen dann in

$$r \rightarrow \infty: \quad \frac{1}{a_-} f + \frac{dg}{dr} = 0 \quad \frac{1}{a_+} g + \frac{df}{dr} = 0 \quad (4)$$

über. Durch Differentiation und Elimination von f bzw. g entstehen die Gleichungen

$$\frac{1}{a_+ a_-} f = -\frac{1}{a_+} \frac{dg}{dr} = \frac{d^2 f}{dr^2} \quad \frac{1}{a_- a_+} g = -\frac{1}{a_-} \frac{df}{dr} = \frac{d^2 g}{dr^2}. \quad (5)$$

Beide Funktionen verhalten sich also asymptotisch wie

$$f, g \sim e^{\pm r/a} \quad \text{mit} \quad a = \sqrt{a_+ a_-}. \quad (6)$$

Als normierbare Lösungen kommen natürlich nur diejenigen mit $e^{-r/a}$ in Betracht. Um das Verhalten für kleine r zu untersuchen, wird für beide Funktionen f und g ein Potenzansatz mit r^ν gemacht. Dabei gehen die Gleichungen (3) in

$$r \rightarrow 0: \quad -\frac{\alpha}{r} f + \frac{\beta+k}{r} g = 0 \quad \frac{\alpha}{r} g + \frac{\beta-k}{r} f = 0 \quad (7)$$

über. Multipliziert man die erste von ihnen mit αr und setzt die zweite ein, so wird

$$\alpha^2 f = \alpha(\beta+k)g = -(\beta-k)(\beta+k)f = -(\beta^2 - k^2)f. \quad (8)$$

Die gesuchte Potenz ist daher

$$\beta = \sqrt{k^2 - \alpha^2} \geq \sqrt{1 - \alpha^2} \quad (9)$$

im Gegensatz zur nichtrelativistischen Theorie, wo nur ganzzahlige Werte für β auftreten.

Nun läßt sich für f und g der Ansatz

$$\begin{cases} f(r) = r^\beta e^{-r/a} A(r) \\ g(r) = r^\beta e^{-r/a} B(r) \end{cases} \quad (10)$$

machen, der das Verhalten für große und kleine r entsprechend berücksichtigt. A und B können dann als Potenzreihen angesetzt werden, die ein Entwicklungsglied nullter Ordnung besitzen müssen. Mit den in (10) noch angegebenen Ab-

leitungen dieser Funktionen wird das Gleichungssystem (3)

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{a_-} - \frac{\alpha}{r}\right) A + \left(\frac{\beta+k}{r} - \frac{1}{a} + \frac{d}{dr}\right) B = 0 \\ \left(\frac{1}{a_+} + \frac{\alpha}{r}\right) B + \left(\frac{\beta-k}{r} - \frac{1}{a} + \frac{d}{dr}\right) A = 0 \end{cases} \quad (11)$$

in ein solches für A und B überführt.

Dieses Gleichungssystem ist bereits mit konstanten Koeffizienten A und B lösbar, wenn die vier Gleichungen

$$\begin{cases} \frac{1}{a_-} A - \frac{1}{a} B = 0 & -\alpha A + (\beta+k)B = 0 \\ \frac{1}{a_+} B - \frac{1}{a} A = 0 & \alpha B + (\beta-k)A = 0 \end{cases} \quad (12)$$

erfüllt werden. Dies ist unter den Bedingungen

$$\frac{A}{B} = \frac{a_-}{a} = \frac{a}{a_+} = \frac{\beta+k}{\alpha} = \frac{\beta-k}{-\alpha} \quad (13)$$

der Fall. Das erste Gleichheitszeichen legt das Amplitudenverhältnis A/B fest, das zweite wird mit (2) und das vierte mit (9) erfüllt. Das dritte legt die Energien der zugehörigen stationären Zustände fest. Seine Auswertung führt auf die weiteren in (28) abgeleitete Formel mit

$$\varrho = 0 \quad k > 0. \quad (14)$$

Die letzte Bedingung folgt ebenfalls aus (13). Weil a und a_+ positiv sind, muß hier auch $\beta+k = \sqrt{k^2 - \alpha^2} + k > 0$ und reell sein, was nur mit $k > 0$ möglich ist.

Allgemein werden die Gleichungen (11) durch den Potenzreihenansatz

$$\begin{cases} A(r) = \sum_{\nu=0}^{\infty} r^\nu A_\nu \\ B(r) = \sum_{\nu=0}^{\infty} r^\nu B_\nu \end{cases} \quad (15)$$

gelöst. Dabei entstehen zunächst die Gleichungen

$$\begin{cases} \sum_{\nu} r^{\nu-1} \left\{ \frac{1}{a_-} A_{\nu-1} - \alpha A_\nu - \frac{1}{a} B_{\nu-1} + (\beta+k+\nu) B_\nu \right\} = 0 \\ \sum_{\nu} r^{\nu-1} \left\{ \frac{1}{a_+} B_{\nu-1} + \alpha B_\nu - \frac{1}{a} A_{\nu-1} + (\beta-k+\nu) A_\nu \right\} = 0 \end{cases} \quad (16)$$

zwischen den Koeffizienten A_ν und B_ν . Sie werden für beliebige r nur erfüllt, wenn die geschweiften Klammern für alle ν -Werte verschwinden. Diese Forderung liefert zwei Rekursionsformeln, die es ermöglichen, alle Koeffizienten A_ν und B_ν aus A_0 allein zu berechnen. A_0 wiederum folgt dann aus der Normierungsbedingung (162.16). Multipliziert man die erste der geschweiften Klammern von (16) mit a_- und die zweite mit a , so liefert die anschließende Addition

$$[-a_- \alpha + a(\beta-k+\nu)] A_\nu + [a\alpha + a_-(\beta+k+\nu)] B_\nu = 0. \quad (17)$$

Bei großen Werten $r \rightarrow \infty$ werden die Funktionen (15) vorwiegend durch die Koeffizienten A_ν und B_ν mit großen ν bestimmt. Für diese vereinfacht sich (17) zu

$$a_\nu A_\nu + a_{-\nu} B_\nu \approx 0, \quad (18)$$

und aus (16) folgt die vereinfachte Rekursionsformel:

$$\nu A_\nu \approx \frac{1}{a} A_{\nu-1} - \frac{1}{a_+} B_{\nu-1} \approx \left(\frac{1}{a} + \frac{1}{a_+} \frac{a_\nu}{a_-} \right) A_{\nu-1} = \frac{2}{a} A_{\nu-1}, \quad (19)$$

sowie eine entsprechende Gleichung für B_ν . Bei sukzessiver Anwendung dieser Formel entsteht

$$A(r) = \sum r^\nu A_\nu \approx \sum r^\nu \left(\frac{2}{a} \right)^\nu \frac{1}{\nu!} A_0 = A_0 e^{+2r/a}, \quad (20)$$

und $A(r)$ wächst für $r \rightarrow \infty$ stärker, als der in (10) abgespaltene Faktor $e^{-r/a}$ abklingt. Normierbare Lösungen f und g entstehen also nur, wenn die in a_+ und a_- enthaltene Energie E gerade einen solchen Wert besitzt, daß die Reihen (15) nach einer endlichen Anzahl ϱ von Gliedern abbrechen, $\varrho > 0$. Hierfür genügt die Forderung, daß

$$A_{\varrho+1} = B_{\varrho+1} = 0 \quad (21)$$

gilt. Die höheren Koeffizienten verschwinden dann alle von selbst, da sie nach (16) zu den nächst niederen proportional sind.

Die Bedingungen (21) führen in den geschweiften Klammern (16) mit $\nu = \varrho + 1$ auf die beiden Gleichungen

$$-\frac{1}{a} B_\varrho + \frac{1}{a_-} A_\varrho = 0 \quad -\frac{1}{a} A_\varrho + \frac{1}{a_+} B_\varrho = 0, \quad (22)$$

die wegen (2) die gleiche Aussage

$$\frac{A_\varrho}{B_\varrho} = \frac{a_-}{a} = \frac{a}{a_+} = \sqrt{\frac{a_-}{a_+}} \quad (23)$$

enthalten. Zusammen mit (17) lautet diese aus (21) und damit aus der Normierungsforderung hervorgehende Bedingung

$$\frac{a_-}{a} = \frac{a_-(\varrho + \beta + k) + a\alpha}{-a(\varrho + \beta - k) + a_-\alpha}. \quad (24)$$

Nach Multiplikation mit den beiden Nennern folgt hieraus

$$(a_-^2 - a^2)\alpha = 2a_-\alpha(\beta + \varrho) \quad (a_+ - a_+)\alpha = 2\sqrt{a_+a_-}(\beta + \varrho). \quad (25)$$

Die zweite Gleichung folgt unter Beachtung von $a^2 = a_+a_-$ aus der ersten. Weitere Umformung ergibt

$$\frac{\beta + \varrho}{\alpha} = \frac{1}{2\sqrt{a_+a_-}}(a_- - a_+) = \frac{\sqrt{a_+a_-}}{2} \left(\frac{1}{a_+} - \frac{1}{a_-} \right) = \sqrt{a_+a_-} \frac{E}{\hbar c}, \quad (26)$$

und hieraus folgt

$$\left(\frac{\alpha}{\beta + \varrho} \right)^2 = \frac{(\hbar c)^2}{E^2 a_- a_+} = \frac{(m c^2)^2 - E^2}{E^2} = \left(\frac{m c^2}{E} \right)^2 - 1. \quad (27)$$

Die Auflösung nach E schließlich führt mit $\beta = \sqrt{k^2 - \alpha^2}$ aus (9) auf

$$E = \frac{m c^2}{\sqrt{1 + \alpha^2}(\varrho + \sqrt{k^2 - \alpha^2})^2} \quad (28)$$

für die Eigenwerte der Energie des Elektrons im Wasserstoffpotential. Das positive Vorzeichen der Wurzel folgt aus (26), da stets $\beta + \varrho > 0$ ist. Nur zu den durch (28) gegebenen Energien also existieren normierbare stationäre Lösungen der DIRACGLEICHUNG. Sie hängen vom Betrag $|k|$ der Spin-Bahn-Quantenzahl k ab sowie von einer radialen Quantenzahl ϱ . Der Ableitung entsprechend gibt ϱ die Ordnung der Polynome $A(r)$ und $B(r)$ an und damit im allgemeinen auch die Zahl der „radialen Knotenflächen“ von ψ .

164 FEINSTRUKTUR DES WASSERSTOFFS

Gleichung (163.28) enthält die von SOMMERFELD auf elementarem Wege gefundene Energieformel für die Feinstruktur des Wasserstoffs. Die in dieser Formel auftretende dimensionslose Konstante

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137,0392} \quad (1)$$

wird als SOMMERFELDSche Feinstrukturkonstante bezeichnet. Ihr kleiner Zahlenwert hat zur Folge, daß sich die Bindungszustände eines Elektrons im Wasserstoffatom alle nur sehr wenig von der Ruhenergie $m c^2$ unterscheiden und sich nur deshalb bereits durch die nichtrelativistische Quantentheorie gut annähern lassen. Die Bindungsenergien sind nach (163.28) um einen Faktor α^2 kleiner als die Ruhenergie $m c^2$. Sie werden in erster Linie durch die sogenannte Hauptquantenzahl $n \equiv \varrho + |k|$ allein bestimmt. Die Abweichungen hiervon sind wiederum um $\alpha^2 \approx 10^{-4}$ kleiner als die Bindungsenergien des Wasserstoffs.

Die SOMMERFELDSche Feinstrukturformel des Wasserstoffs soll jetzt etwas genauer ausgewertet werden. Dazu wird die radiale Quantenzahl ϱ ähnlich wie in der nichtrelativistischen Quantentheorie zunächst durch die Hauptquantenzahl n ersetzt:

$$E = \frac{m c^2}{\sqrt{1 + \alpha^2}(n + \sqrt{k^2 - \alpha^2} - |k|)^2} \quad n = \varrho + |k|. \quad (2)$$

Die Entwicklung dieses Ausdrucks nach Potenzen von α liefert für die Glieder bis zur vierten Ordnung

$$E = m c^2 - \frac{m c^2 \alpha^2}{2 n^3} - \frac{m c^2 \alpha^4}{2 n^3} \left(\frac{1}{|k|} - \frac{3}{4 n} \right) \pm \dots \quad (3)$$

Der erste Term enthält die Ruhenergie und der zweite die nur von der Gesamtquantenzahl n abhängige Bindungsenergie in nichtrelativistischer Näherung. Es ist dabei zu beachten, daß $m c^2 \alpha^2 = m e^4 / (4 \pi \epsilon_0 \hbar)^2$ ist und dieser Ausdruck

nicht von c abhängt. Der dritte Term in (3) ist proportional zu $1/c^2$ und enthält als wichtigste relativistische Korrektur den Einfluß der Spin-Bahn-Kopplung sowie

den der übrigen Terme von (146.19). In Abb. 164 ist das Schema der Wasserstoffterme dargestellt. Auf der linken Seite befinden sich die Terme der nichtrelativistischen Theorie, rechts daneben ist die beobachtete Aufspaltung dargestellt. Nach der DIRACSCHEN Theorie sollten die beiden Terme $2s_{1/2}$ und $2p_{1/2}$ streng miteinander entartet sein, da sie zum gleichen $|k|$ gehören. Beobachtet wird hingegen auch noch eine verhältnismäßig kleine Aufspaltung dieser Terme, die durch Strahlungskorrekturen höherer Ordnung hervorgerufen und als LAMBShift bezeichnet wird.

Weiter wird die durch die Korrektur entstandene Aufspaltung untersucht, hervorgerufen durch verschiedene k -Werte zum gleichen n und l . Sie bewirken eine Aufspaltung

die sich insbesondere bei kleinen Werten von n und l bemerkbar macht. Diese Aufspaltung findet ihre anschauliche Erklärung im Wirken der in [155] besprochenen Spin-Bahn-Kopplung, deren Einfluß in der zusätzlichen Wechselwirkung (155.5) besteht und durch

$$E_{SB} = -\frac{1}{2} \overline{U_S} \mathfrak{B} = \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \frac{2\mathfrak{S}}{\hbar^2} \quad (5)$$

beschrieben wird. Der Erwartungswert von dV/dr mit den nichtrelativistischen Eigenfunktionen des Wasserstoffproblems ist $m^3 c^4 \alpha^4 / \hbar^2 n^3 l(l + 1/2)(l + 1)$.

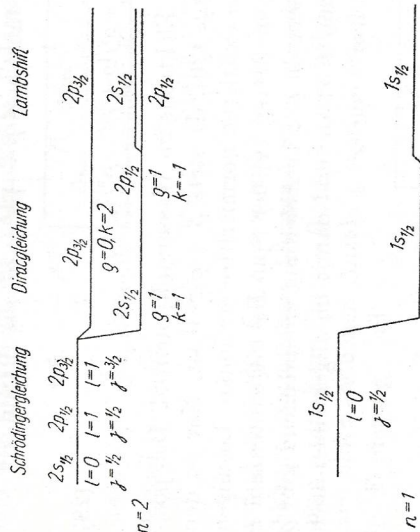


Abb. 164. Die niedrigsten Energiet Terme des Wasserstoffs. Links nichtrelativistische Theorie, Mitte DIRACGLEICHUNG und rechts die von der Quantenelektrodynamik erfaßten Strahlungskorrekturen

Further will be discussed the correction arising from the splitting, caused by different k -values for the same n and l . This causes a splitting

$$\Delta E = -\frac{m c^2 \alpha^4}{2 n^3} \left(\frac{1}{|k|_{\max}} - \frac{1}{|k|_{\min}} \right) = \frac{m c^2 \alpha^4}{2 n^3 l(l+1)} \quad (4)$$

wegen $|k| = j + \frac{1}{2} = \begin{cases} l+1 \\ l \end{cases}$,

which is especially noticeable for small values of n and l .

This splitting can be explained in a simple way in the action of the spin-orbit interaction (155.5) which consists of

$$E_{SB} = -\frac{1}{2} \overline{U_S} \mathfrak{B} = \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \frac{2\mathfrak{S}}{\hbar^2} \quad (5)$$

described. The expectation value of dV/dr with the non-relativistic eigenfunctions of the hydrogen atom is $m^3 c^4 \alpha^4 / \hbar^2 n^3 l(l + 1/2)(l + 1)$.

Damit und mit den Eigenwerten (155.11) von $2\mathfrak{S}$ entsteht als Energiedifferenz

$$\Delta E = \frac{1}{4} \frac{m c^2 \alpha^4}{n^3 l(l + 1/2)(l + 1)} \left[\left(\frac{2\mathfrak{S}}{\hbar^2} \right)_{j=l-1/2} - \left(\frac{2\mathfrak{S}}{\hbar^2} \right)_{j=l+1/2} \right] = \frac{m c^2 \alpha^4}{2 n^3 l(l + 1)}, \quad (6)$$

also der gleiche Ausdruck wie oben in (4). Das ist nicht weiter überraschend, sondern zeigt vielmehr die Konsistenz der in dieser Theorie durchgeführten Überlegungen. Die Energiedifferenz ΔE in (4) wurde durch exakte Auswertung der DIRACGLEICHUNG und anschließende Entwicklung des Ergebnisses (2) nach Potenzen von $1/c^2$ berechnet. ΔE in (6) dagegen wurde durch Entwicklung der DIRACGLEICHUNG selbst nach Potenzen von $1/c^2$ und anschließende Auswertung gewonnen. Beide Wege führen also hier, wie der Vergleich von (4) und (6) zeigt, zum gleichen Resultat.

17 Weiterer Ausbau der Theorie

Zusammenfassung: Die in [11] bis [16] untersuchte Theorie kam auf Mehrteilchenprobleme erweitert werden. Im Einklang mit dem PAULISCHEN Auswahlprinzip muß die Gesamtwellenfunktion antisymmetrisch sein. Dadurch tritt bei Erwartungswerten der Wechselwirkung zweier Teilchen zum gewöhnlichen Erwartungswert noch ein sogenanntes Austauschglied hinzu. — Die DIRACSCHE Löchertheorie ist eine Hypothese, nach der alle Teilchenzustände negativer Energie von Elektronen besetzt sein sollen. Sie macht verständlich, daß es stabile Elektronen positiver Energie gibt, die wegen des Ausschließungsprinzips nicht mehr in negative Zustände hinunterfallen können. Sie erklärt andererseits die Paarerzeugung von Elektron und Positron als einen Photoeffekt, bei dem die Energie $E > 2 m c^2 \approx 1$ MeV eines Photons auf ein Elektron negativer Energie übertragen wird und dieses bis in den positiven Energiebereich anhebt. Das im negativen Energiebereich zurückbleibende „Loch“ ist das Positron.

171 Mehrteilchenprobleme

Alle bisherigen Überlegungen zum relativistischen Elektron betrafen ein einzelnes Teilchen im vorgegebenen Feld. Beim Auftreten mehrerer Teilchen zeigen sich einige Besonderheiten, die hier zusammengefaßt werden sollen. Zunächst betrachten wir N DIRACTEILCHEN ohne gegenseitige Wechselwirkung in einem gemeinsamen äußeren Feld. Der gesamte HAMILTONOPERATOR H läßt sich dann in der Form

$$H = \sum_{i=1}^N h(i) \quad (1)$$

als eine Summe aus den HAMILTONOPERATOREN $h(i)$ für die einzelnen Teilchen $i = 1, \dots, N$ zusammensetzen. Die verschiedenen $h(i)$ sind untereinander gleich. Sie unterscheiden sich lediglich durch die Koordinaten (und Spinorindizes) i , auf die sie angewandt werden, $h(1)$ erfüllt die Eigenwertgleichung

$$h(1) \psi_n(1) = \epsilon_n \psi_n(1). \quad (2)$$