Teil A

11. Nichtrelativistischer Grenzfall der Dirac-Gleichung und schwach relativistische Korrekturen **16 Pkt.**

Im nichtrelativistichen Fall ist mc^2 die größte Energie des Problems. Das motiviert den Ansatz

$$\psi = \exp\left(-\mathrm{i}\frac{mc^2}{\hbar}t\right)\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$$

mit Funktionen φ und χ, die nur *schwach* von der Zeit abhängen.

(a) Benützen Sie diesen Ansatz, um aus der Dirac-Gleichung (2 Pkt.)

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} = c\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma}\left(\boldsymbol{p}-{}^{q}\!/_{c}\boldsymbol{A}\right)\chi\\ \boldsymbol{\sigma}\left(\boldsymbol{p}-{}^{q}\!/_{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi\end{pmatrix} + q\Phi\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} - 2mc^2\begin{pmatrix}0\\ \chi\end{pmatrix} \tag{11.1}$$

abzuleiten. Zeigen Sie, dass in niedrigster Ordnung in Potenzen von $1/c$ gilt

$$\chi = \frac{1}{2mc}\,\boldsymbol{\sigma}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi\,. \tag{11.2}$$

Hinweis: Überlegen Sie sich, welche Terme in der zweiten Zeile von Gl. (11.1) die beiden größten sind. Alle anderen kann man in erster Näherung weglassen.

(b) Leiten Sie mithilfe dieses Ergebnisses die *Pauli-Gleichung* ab: (4 Pkt.)

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi = \left(\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - \frac{q\hbar}{2mc}\,\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{B} + q\Phi\right)\varphi \tag{11.3}$$

(Warum ist diese bis zur Ordnung $1/c$ exakt?) Zeigen Sie, dass der landésche g-Faktor für den Spin $g = 2$ ist.

Hinweis: Setzen Sie $\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}$ und formen Sie dann die Gleichung so um, dass der Bahndrehimpuls darin auftaucht.

(c) Zwecks Berechnung der nächsten relativistischen Korrekturen muss die zweite Gleichung in (11.1) durch Iteration etwas genauer gelöst werden. Dazu setzt man in der exakten Gleichung das Näherungsergebnis (11.2) in den ursprünglich vernachlässigten kleineren Termen ein und löst erneut nach χ auf. Der Einfachheit halber betrachten wir nur den Fall $\boldsymbol{A} = 0$. Zeigen Sie, dass dafür aus der ersten Gleichung von (11.1) folgt: (3 Pkt.)

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi = \left\{\left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}\right)\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+q\Phi\right) + \frac{q}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\,\Phi\,(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\right\}\varphi \equiv H'\varphi \tag{11.4}$$

Wieso erhält man auf diese Weise alle Korrekturen bis zur Ordnung $1/c^2$?

(d) Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeitsdichte $\varrho = \|\varphi\|^2 + \|\chi\|^2$ bis zur Ordnung $1/c^2$. (Ergebnis: $\rho = \|\varphi\|^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\|(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\nabla})\,\varphi\|^2$.) Um im Schrödingerbild voranzukommen, benötigen wir eine neue Wellenfunktion φ_s, so dass gilt $\langle\varphi_s\,|\,\varphi_s\rangle = \int\varrho\,\mathrm{d}^3x$. Zeigen Sie, dass dies erreicht wird durch: (3 Pkt.)

$$\varphi_s = \left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\varphi$$

(e) Verifizieren Sie, dass gilt (4 Pkt.)

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi_s = H\varphi_s \quad \text{mit} \quad H = \left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)H'\left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right) \tag{11.5}$$

und zeigen Sie

$$\begin{aligned} H &= \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + q\Phi + \tilde{H} \\ \tilde{H} &= \underbrace{-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}}_{\text{Dispersionsterm}} \underbrace{-\frac{q\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\left(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{p}\right)}_{\text{Spin-Bahn-Term}} \underbrace{-\frac{q\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla\cdot\boldsymbol{E}}_{\text{Darwin-Term}} \end{aligned} \tag{11.6}$$

Interpretieren Sie den Dispersionsterm und den Spin-Bahn-Term (für kugelsymmetrische Potentiale Φ).

Lösung:

(a) Wir gehen von der Dirac-Gleichung in der Form

$$\left\{\alpha_\mu\left(p^\mu - \frac{q}{c}A^\mu\right) - \alpha^m mc\right\}\psi = 0$$

Setzen wir dort

$$p^0 = \frac{\mathrm{i}\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \qquad A \overset{\text{cgs}}{=} (\Phi, \boldsymbol{A}) \qquad \text{und} \qquad \alpha_0 = \mathbb{1}, \quad \alpha_i = -\begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}$$

ein, können wir sie als

$$\left\{\frac{\mathrm{i}\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \frac{q}{c}\Phi - \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) - \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} mc\right\}\psi = 0$$

schreiben. Setzen wir hier den Ansatz

$$\psi = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{mc^2}{\hbar}t}\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$$

ein, erhalten wir

$$\frac{\mathrm{i}\hbar}{c}\left[-\mathrm{i}\frac{mc^2}{\hbar}\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \dot\varphi \\ \dot\chi \end{pmatrix}\right] - \frac{q}{c}\Phi\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} - \boldsymbol{\sigma}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\begin{pmatrix} \chi \\ \varphi \end{pmatrix} - mc\begin{pmatrix} \varphi \\ -\chi \end{pmatrix} = 0\,.$$

Hierbei haben wir bereits duch den Faktor $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{mc^2}{\hbar}t}$ geteilt, der bei jedem Term auftritt und von Null verschieden ist. Multiplizieren wir die Gleichung mit c, fassen Terme zusammen und stellen nach den Zeitableitungen um, ergibt sich direkt

$$\mathrm{i}\hbar\begin{pmatrix} \dot\varphi \\ \dot\chi \end{pmatrix} = q\Phi\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + c\boldsymbol{\sigma}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\begin{pmatrix} \chi \\ \varphi \end{pmatrix} - 2mc^2\begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix}\,. \tag{11.7}$$

Um eine Näherung zu erhalten, betrachten wir die zweite Zeile

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\dot\chi &= q\Phi\chi + c\boldsymbol{\sigma}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi - 2mc^2\chi \\ \Rightarrow \quad \chi &= \frac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi + \frac{q}{2mc^2}\Phi\chi - \frac{\mathrm{i}\hbar}{2mc^2}\dot\chi\,. \end{aligned} \tag{11.8}$$

Da wir hier den nichtrelativistischen Grenzfall betrachten wollen, können wir in dieser Gleichung versuchen, die subdominanten Terme einfach zu vernachlässigen. Da mc^2 die größte Energie des Systems sein soll, gilt sicherlich

$$mc^2 \gg q\Phi \,.$$

Da die Funktionen φ und χ zeitlich langsam variieren, ist $\dot{\chi}$ klein und wir vernachlässigen es ebenfalls. Die sich so ergebende Gleichung können wir direkt zu

$$\chi = \frac{1}{2mc}\,\boldsymbol{\sigma}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi$$

auflösen. Wir könnten auch einfach in Gleichung (11.8), die nach Potenzen von $1/c$ sortiert ist, diese „Entwicklung“ nach dem „konstanten“ und dem in $1/c$ linearen Term abbrechen.

Anmerkung: Tatsächlich zeigt das Ergebnis allerdings, dass der „konstante“ Term bereits $\mathcal{O}(1/c)$ ist. Wir können also die sichtbaren Potenzen von $1/c$ nicht ohne Weiteres mit der Ordnung des zugehörigen Terms identifizieren. Wiedereinsetzen der Näherung für χ in die Terme der formalen Ordnung $1/c^2$ aus Gleichung (11.8) zeigt, dass diese tatsächlich von der Ordnung $1/c^3$ sind (wenn man annimmt, dass $\boldsymbol{\sigma}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)$ von der Ordnung 1 ist).

(b) Wir benutzen die letzte Gleichung aus (a) und setzen sie in die erste Zeile von (11.7) ein:

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\dot{\varphi} &= q\Phi\varphi + c\boldsymbol{\sigma}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\frac{1}{2mc}\,\boldsymbol{\sigma}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi \\
&= q\Phi\varphi + \frac{1}{2m}\left(\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\left[\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\times\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]\right)\varphi \\
&= q\Phi\varphi + \frac{1}{2m}\left(\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - \frac{\mathrm{i}q}{c}\boldsymbol{\sigma}\left(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{p} + \boldsymbol{p}\times\boldsymbol{A}\right)\right)\varphi \\
&= q\Phi\varphi + \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\varphi - \frac{\mathrm{i}q}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\left(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{p} + \boldsymbol{p}\times\boldsymbol{A}\right)\varphi
\end{aligned}$$

Hierbei haben wir für die zweite Gleichheit die Formel

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}) + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\,(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) \tag{11.9}$$

aus der Vorlesung benutzt. Für die vorletzte Gleichung haben wir nur verwendet, dass $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A} = 0$ und $\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p} = 0$ gelten. Den letzten Term der Gleichung können wir noch weiter vereinfachen. Dazu betrachten wir die i-te Komponente der beiden Kreuzprodukte:

$$\begin{aligned}
\left[\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{p} + \boldsymbol{p}\times\boldsymbol{A}\right]_i\varphi &= \left[\varepsilon_{ijk}A_j p_k + \varepsilon_{ikj}p_k A_j\right]\varphi \\
&= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\varepsilon_{ijk}A_j\partial_k + \varepsilon_{ikj}\partial_k A_j\right)\varphi \\
&= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\varepsilon_{ijk}A_j\partial_k - \varepsilon_{ijk}\partial_k A_j\right)\varphi \\
&= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\varepsilon_{ijk}\left(A_j\left(\partial_k\varphi\right) - \partial_k\left(A_j\varphi\right)\right) \\
&= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\varepsilon_{ijk}\left(A_j\left(\partial_k\varphi\right) - A_j\left(\partial_k\varphi\right) - \left(\partial_k A_j\right)\varphi\right) \\
&= -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\varepsilon_{ijk}\left(\partial_k A_j\right)\varphi = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left[\nabla\times\boldsymbol{A}\right]_i\varphi = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{B}_i\varphi\,.
\end{aligned}$$

Damit erhalten wir als erste Näherung der Dirac-Gleichung im nichtrelativistischen Grenzfall die sog. Pauli-Gleichung:

$$i\hbar\dot{\varphi} = \left\{ q\Phi + \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - \frac{q\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B} \right\} \varphi$$

Da beim Einsetzen von χ in die erste Zeile von (11.7) eine Multiplikation mit einem Faktor c stattfand, könnte man annehmen, dass das Ergebnis nur bis zur konstanten Ordnung exakt ist, denn χ war als Näherung der Ordnung $1/c$ abgeleitet worden [die vernachlässigten Terme waren formal $\mathcal{O}(1/c^2)$]. Aus der Anmerkung oben wissen wir aber, dass χ tatsächlich bis zur Ordnung $1/c^2$ exakt ist, weshalb wir hier die Ordnung $1/c$ noch richtig erhalten.

Um den landéschen g-Faktor zu bestimmen, können wir den Hinweis benutzen und finden mit wenigen Umformungen:

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\varphi} &= \left\{ q\Phi + \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{2c}\left(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}\right)\right)^2 - \frac{q\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{B} \right\} \varphi \\ &= \left\{ q\Phi + \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + \frac{q^2}{8mc^2}\left(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}\right)^2 - \frac{q}{2mc}\underbrace{\boldsymbol{p}\left(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}\right)}_{=\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})=\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{L}} - \frac{q\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{B} \right\} \varphi \\ &= \left\{ q\Phi + \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + \frac{q^2}{8mc^2}\left(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}\right)^2 - \frac{q}{2mc}\boldsymbol{B}\left(\boldsymbol{L} + 2\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}\right) \right\} \varphi \,. \end{aligned}$$

Dabei haben wir nur benutzt, dass p_i und r_j für $i \neq j$ vertauschen. Darum konnten wir im Spatprodukt zyklisch vertauschen und für die zweite Gleichung die Terme $\boldsymbol{p}\left(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}\right)$ und $\left(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}\right)\boldsymbol{p}$ zusammenfassen. Jetzt können wir den letzten Term interpretieren. Er entspricht der Wechselwirkung des magnetischen Moments mit dem $\boldsymbol{B}$-Feld

$$\frac{q}{2mc}\boldsymbol{B}\left(\boldsymbol{L} + 2\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}\right).$$

Allgemein gilt für die Wechselwirkungsenergie von Systemen bei denen sich der Gesamtdrehimpuls aus Bahndrehimpuls und Spin zusammensetzt

$$\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{B}\cdot\left(\boldsymbol{\mu}_l + \boldsymbol{\mu}_s\right) = \frac{q}{2mc}\boldsymbol{B}\cdot\left(g_l\boldsymbol{L} + g_s\boldsymbol{S}\right) \,.$$

Wir erhalten das Ergebnis

$$g_s = 2$$

für das Elektron, wenn wir

$$\boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$$

als Spinoperator verwenden und feststellen, dass in der Klammer $\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S}$ steht. Da der Landé-Faktor g_l des Bahndrehimpulses natürlich eins ist, muss der des Spins nach Adam Riese 2 sein. Der Landé-Faktor des Gesamtsystems kann ebenfalls berechnet werden. Der Gesamtimpuls $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$ ist wegen $g_l \neq g_s$ nicht parallel zu $\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2mc}(g_l \boldsymbol{L} + g_s \boldsymbol{S})$. In einem Quantenzustand wirkt sich nur die zu $\boldsymbol{J}$ parallele Komponente aus

$$\boldsymbol{\mu}_{\|} = \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{J}}{\boldsymbol{J}^2} \boldsymbol{J} \stackrel{!}{=} g_j \frac{q}{2mc} \boldsymbol{J}.$$

Der Landé-Faktor g_j berechnet sich dann mit

$$g_j = \frac{2mc}{q} \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{J}}{\boldsymbol{J}^2} = \frac{2mc}{q} \frac{(\boldsymbol{\mu}_l + \boldsymbol{\mu}_s) \cdot \boldsymbol{J}}{\boldsymbol{J}^2} = \frac{(g_l \boldsymbol{L} + g_s \boldsymbol{S}) \cdot \boldsymbol{J}}{\boldsymbol{J}^2}.$$

Die Produkte $\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{J}$ und $\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{J}$ kann man wie folgt umschreiben:

$$\boldsymbol{S}^2 = (\boldsymbol{J} - \boldsymbol{L})^2 = \boldsymbol{J}^2 - 2\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{J} + \boldsymbol{L}^2 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{J} = \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{S}^2 + \boldsymbol{L}^2 \right)$$
$$\boldsymbol{L}^2 = (\boldsymbol{J} - \boldsymbol{S})^2 = \boldsymbol{J}^2 - 2\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{J} + \boldsymbol{S}^2 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{J} = \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{J}^2 + \boldsymbol{S}^2 - \boldsymbol{L}^2 \right)$$

Drückt man nun $\boldsymbol{J}^2$, $\boldsymbol{S}^2$ und $\boldsymbol{L}^2$ durch ihre Quantenzahlen $\hbar^2 J(J+1)$, $\hbar^2 S(S+1)$ und $\hbar^2 L(L+1)$ aus, erhält man die Formel:

$$g_j = \frac{1}{2J(J+1)} \Big(g_l [J(J+1) - S(S+1) + L(L+1)] \\ + g_s [J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)] \Big).$$

Er hängt also vom tatsächlich vorliegenden Wert des Bahndrehimpulses (und des Gesamtdrehimpulses) ab, wenn wir $S = 1/2$ als gegeben voraussetzen.

(c) Da wir ab dieser Stelle $\boldsymbol{A} \equiv 0$ setzen, schreiben wir zur besseren Übersicht unser System (11.7) aus (a) noch einmal auf

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\varphi} = c(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\chi + q\Phi\varphi \tag{11.10a}$$
$$\mathrm{i}\hbar\dot{\chi} = c(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\varphi + q\Phi\chi - 2mc^2\chi\,. \tag{11.10b}$$

Um die nächsten relativistischen Korrekturen zu erhalten, müssen wir unsere erste Näherung

$$\chi = \frac{1}{2mc}(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\varphi \tag{11.10c}$$

in die vorher vernachlässigten Terme einsetzen (siehe Teilaufgabe (a)). Benutzen wir also in (11.10b) die Relation (11.10c), ergibt sich

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\frac{1}{2mc}(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\dot{\varphi} &= c(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\varphi + \frac{q\Phi}{2mc}(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\varphi - 2mc^2\chi \\
\Longrightarrow \quad \chi &= -\frac{(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})}{4m^2c^3}\underline{\mathrm{i}\hbar\dot{\varphi}} + \frac{(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\varphi}{2mc} + \frac{q}{4m^2c^3}\Phi(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\varphi \\
&\underset{(11.10a)}{=} -\frac{(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})}{4m^2c^3}\Big(c(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\underline{\chi} + q\Phi\varphi\Big) + \frac{(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\varphi}{2mc} + \frac{q}{4m^2c^3}\Phi(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\varphi \\
&\underset{(11.10c)}{=} -\frac{(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})}{4m^2c^3}\left(\frac{(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})}{2m}\varphi + q\Phi\varphi\right) + \frac{(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\varphi}{2mc} + \frac{q}{4m^2c^3}\Phi(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\varphi\,.
\end{aligned} \tag{11.11}$$

Die unterstrichenen Terme sollen zeigen, wo eine Ersetzung zur nächsten Zeile hin gemacht worden ist. Betrachten wir zwischendurch noch einmal Gleichung (11.9) für $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B} = \boldsymbol{p}$:

$$(\boldsymbol{\sigma p})\,(\boldsymbol{\sigma p}) = \boldsymbol{p}^2 + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\,(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{p}) = \boldsymbol{p}^2\,. \tag{11.12}$$

Damit erhalten wir zunächst als zweite Näherung

$$\chi = -\frac{(\boldsymbol{\sigma p})}{4m^2c^3}\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\varphi + q\Phi\varphi\right) + \frac{(\boldsymbol{\sigma p})\varphi}{2mc} + \frac{q}{4m^2c^3}\Phi(\boldsymbol{\sigma p})\varphi\,.$$

Jetzt können wir als nächsten Schritt den ersten Term der rechten Seite von (11.10a) bestimmen:

$$\begin{aligned}
c(\boldsymbol{\sigma p})\chi &= -\frac{(\boldsymbol{\sigma p})(\boldsymbol{\sigma p})}{4m^2c^2}\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\varphi + q\Phi\varphi\right) + \frac{(\boldsymbol{\sigma p})(\boldsymbol{\sigma p})\varphi}{2m} \\
&\qquad + \frac{q}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma p})\Phi(\boldsymbol{\sigma p})\varphi \\
&\underset{(11.12)}{=} -\frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\varphi + q\Phi\varphi\right) + \frac{\boldsymbol{p}^2\varphi}{2m} + \frac{q}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma p})\Phi(\boldsymbol{\sigma p})\varphi \\
&= \left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2} - \frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}q\Phi + \frac{q}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma p})\Phi(\boldsymbol{\sigma p})\right)\varphi
\end{aligned}$$

Dies können wir jetzt in (11.10a) einsetzen und erhalten

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\varphi} = \left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2} - \frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}q\Phi + \frac{q}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma p})\Phi(\boldsymbol{\sigma p}) + q\Phi\right)\varphi\,. \tag{11.13}$$

Den gleichen Ausdruck erhält man, wenn man Gleichung (11.4) ausmultipliziert. Damit ist dies die zweite relativistische Korrekur.

Anmerkung: Dies war die *brute-force*-Methode. Es geht auch etwas eleganter. Die erste Gleichung von (11.11)

$$\chi = -\frac{(\boldsymbol{\sigma p})}{4m^2c^3}\mathrm{i}\hbar\dot{\varphi} + \frac{(\boldsymbol{\sigma p})\varphi}{2mc} + \frac{q}{4m^2c^3}\Phi(\boldsymbol{\sigma p})\varphi$$

muss nämlich gar nicht weiter umgeformt werden, man kann sie direkt in (11.10a)

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\varphi} = c(\boldsymbol{\sigma p})\chi + q\Phi\varphi$$

einsetzen und dann nach $\dot{\varphi}$ auflösen.

Das liefert

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\dot{\varphi} &= c(\boldsymbol{\sigma p})\left[-\frac{(\boldsymbol{\sigma p})}{4m^2c^3}\mathrm{i}\hbar\dot{\varphi} + \frac{(\boldsymbol{\sigma p})\varphi}{2mc} + \frac{q}{4m^2c^3}\Phi(\boldsymbol{\sigma p})\varphi\right] + q\Phi\varphi \\
&= -\mathrm{i}\hbar\frac{(\boldsymbol{\sigma p})^2}{4m^2c^2}\dot{\varphi} + \frac{(\boldsymbol{\sigma p})^2\varphi}{2m} + \frac{q}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma p})\Phi(\boldsymbol{\sigma p})\varphi + q\Phi\varphi
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow\quad \mathrm{i}\hbar\left(1 + \frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}\right)\dot{\varphi} = \left\{\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + q\Phi + \frac{q}{4m^2c^2}\,(\boldsymbol{\sigma p})\,\Phi\,(\boldsymbol{\sigma p})\right\}\varphi\,, \tag{11.14}$$

wobei wir $(\boldsymbol{\sigma p})^2 = \boldsymbol{p}^2$ verwendet haben. Um nach $\dot{\varphi}$ aufzulösen, müssen wir nur von links mit dem Inversen des Operators $1 + \boldsymbol{p}^2/4m^2c^2$ durchmultiplizieren, was im Allgemeinen eine schwierige Aufgabe sein könnte, in der Näherung $\boldsymbol{p}^2/2m \ll mc^2$ aber bei Beschränkung auf $\mathcal{O}(1/c^2)$ trivial ist:

$$\left(1 + \frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}\right)^{-1} = 1 - \frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2} + \mathcal{O}(1/c^4)\,.$$

Multiplizieren wir hiermit durch und berücksichtigen noch, dass der letzte Term in (11.14) bereits $\mathcal{O}(1/c^2)$ ist, d.h. wir für diesen Term durch die Multiplikation nur Korrekturen in $\mathcal{O}(1/c^4)$ generieren (wir also den Term als nur mit eins multipliziert ansehen können), so erhalten wir:

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\varphi} = \left\{\left(1 - \frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}\right)\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + q\Phi\right) + \frac{q}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma p})\,\Phi\,(\boldsymbol{\sigma p})\right\}\varphi\,, \tag{11.15}$$

was Gleichung (11.4) ist.

(d) Da wir die Wahrscheinlichkeitsdichte bis zur Ordnung $1/c^2$ bestimmen sollen und die Spinoren dort quadratisch eingehen, können wir unsere Näherung (11.10c) in die Definition einsetzen:

$$\begin{aligned}\varrho &= \|\varphi\|^2 + \|\chi\|^2 = \|\varphi\|^2 + \left\|\frac{1}{2mc}(\boldsymbol{\sigma p})\varphi\right\|^2 = \|\varphi\|^2 + \left|-\frac{\hbar}{2mc\mathrm{i}}\right|^2 \|(\boldsymbol{\sigma}\nabla)\varphi\|^2 \\ &= \|\varphi\|^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\|(\boldsymbol{\sigma}\nabla)\varphi\|^2\,.\end{aligned}$$

Wir setzen

$$\varphi_s = \left(1 + \frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\varphi$$

und bringen $\int \varrho\,\mathrm{d}^3x$ und $\langle\varphi_s \mid \varphi_s\rangle$ auf dieselbe Form.

$$\begin{aligned}\int \varrho\,\mathrm{d}^3x &= \int \|\varphi\|^2\,\mathrm{d}^3x + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\int \left[(\boldsymbol{\sigma}^*\nabla)\varphi^*\right]^T(\boldsymbol{\sigma}\nabla)\varphi\,\mathrm{d}^3x \\ &= \int \|\varphi\|^2\,\mathrm{d}^3x + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\int \underbrace{\left[\sigma_i^*\partial_i\varphi^*\right]^T\sigma_j\partial_j\varphi}_{\left[\partial_i\varphi^*\right]^T\sigma_i\sigma_j\partial_j\varphi}\,\mathrm{d}^3x\end{aligned}$$

$$= \int \|\varphi\|^2 \, \mathrm{d}^3x + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \int \left(\partial_i \varphi^\dagger \delta_{ij} \partial_j \varphi + \mathrm{i} \sum_{k=1}^{3} \varepsilon_{ijk} \partial_i \varphi^\dagger \sigma_k \partial_j \varphi \right) \mathrm{d}^3x \qquad (+)$$

$$\underset{\text{Gauss}}{=} \int \|\varphi\|^2 \, \mathrm{d}^3x - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \left(\sum_{i=1}^{3} \int \varphi^\dagger \partial_i \partial_i \varphi \, \mathrm{d}^3x \right.$$

$$\left. + \mathrm{i} \sum_k \int \varphi^\dagger \sigma_k \underbrace{\sum_i \sum_j \varepsilon_{ijk} \partial_i \partial_j \varphi}_{0} \, \mathrm{d}^3x \right)$$

$$= \int \|\varphi\|^2 \, \mathrm{d}^3x - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \int \varphi^\dagger \nabla^2 \varphi \, \mathrm{d}^3x = \int \|\varphi\|^2 \, \mathrm{d}^3x + \frac{1}{4m^2c^2} \int \varphi^\dagger \boldsymbol{p}^2 \varphi \, \mathrm{d}^3x$$

$$= \int \varphi^\dagger \left(1 + \frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2} \right) \varphi \, \mathrm{d}^3x = \left\langle \varphi \middle| 1 + \frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2} \middle| \varphi \right\rangle .$$

Man kann diese Rechnung kürzer und eleganter darstellen, wenn man von vorneherein klärt, dass die Skalarproduktbildung eine Kombination aus Multiplikation mit einem adjungierten Vektor und Integration über den Ortsraum ist. Der Operator $\boldsymbol{\sigma}$ ist dann selbstadjungiert im Raum der 2×2-Matrizen mit dem üblichen Skalarprodukt von zweidimensionalen Vektoren (bzw. Spinoren), der Operator $\boldsymbol{p}$ hingegen ist selbstadjungiert bezüglich des Skalarprodukts, das durch die Ortsintegration definiert ist. Die Bildung des adjungierten Operators zu $(\boldsymbol{\sigma p})$ ist innerhalb des kombinierten Skalarprodukts unproblematisch, formale Rechnungen bleiben richtig.

$$\langle \chi | \chi \rangle = \frac{1}{4m^2c^2} \langle (\boldsymbol{\sigma p})\varphi | (\boldsymbol{\sigma p})\varphi \rangle = \frac{1}{4m^2c^2} \langle \varphi | (\boldsymbol{\sigma p})^\dagger (\boldsymbol{\sigma p})\varphi \rangle = \frac{1}{4m^2c^2} \langle \varphi | (\boldsymbol{p}^\dagger \boldsymbol{p})\varphi \rangle$$

$$= \frac{1}{4m^2c^2} \langle \varphi | (\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{p})\varphi \rangle = \frac{1}{4m^2c^2} \langle \varphi | \boldsymbol{p}^2 | \varphi \rangle$$

Nun müssen wir noch $\langle \varphi_s \mid \varphi_s \rangle$ betrachten:

$$\langle \varphi_s \mid \varphi_s \rangle = \left\langle \left(1 + \frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2} \right) \varphi \middle| \left(1 + \frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2} \right) \varphi \right\rangle$$

$$= \left\langle \varphi \middle| \left(1 + \frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2} \right)^2 \varphi \right\rangle = \left\langle \varphi \middle| 1 + \frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2} \middle| \varphi \right\rangle + \mathcal{O}\left(\frac{1}{c^4} \right) .$$

Das war zu beweisen.

Anmerkung: Was man eigentlich gern hätte, ist ein Spinor φ_s, der $\|\varphi_s(\boldsymbol{x})\|^2 = \varrho(\boldsymbol{x})$ erfüllt. Das gilt mit $\varphi_s = \left(1 + \frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right) \varphi$ leider nicht notwendigerweise. Das Problem ist, dass in $\varphi_s^\dagger(\boldsymbol{x}) \varphi_s(\boldsymbol{x}) = \left[\left(1 - \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 \right) \varphi^\dagger \right] \left(1 - \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 \right) \varphi$ das Quadrat des Impulsoperators nicht rechts von $\varphi^\dagger$ geschrieben werden darf, denn die hier stehende Adjunktion ist nur eine im Spinorenraum. Nur bei Adjunktion bezüglich des Skalarprodukts im Ortsraum (also unter einem Integral) kann der Impulsoperator nach rechts gezogen werden. Verwirren kann hier zusätzlich, dass man für beide Adjunktionen ein- und dasselbe Symbol † verwendet.

Wir dürfen nur im Spinorenraum adjungieren, nicht im Ortsraum, denn das Ergebnis soll ja ortsabhängig bleiben. Eine detaillierte Betrachtung liefert folgende

Ergebnisse:

$$
\begin{aligned}
\|\varphi_s\|^2 = \varphi_s^\dagger(\boldsymbol{x})\varphi_s(\boldsymbol{x}) &= \left[\left(1-\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2\right)\varphi^\dagger\right]\left(1-\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2\right)\varphi \\
&= \varphi^\dagger\varphi - \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}(\nabla^2\varphi^\dagger)\varphi - \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\varphi^\dagger(\nabla^2\varphi) + \underbrace{\left(\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\right)^2(\nabla^2\varphi^\dagger)(\nabla^2\varphi)}_{\mathcal{O}(1/c^4)} \\
&= \varphi^\dagger\varphi - \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\left[\nabla\left(\nabla(\varphi^\dagger\varphi)\right) - 2(\nabla\varphi^\dagger)(\nabla\varphi)\right] + \mathcal{O}(1/c^4) \\
&= \|\varphi\|^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\|\nabla\varphi\|^2 - \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla\cdot\left(\nabla\|\varphi\|^2\right) + \mathcal{O}(1/c^4)\,,
\end{aligned}
$$

hier wurde benutzt:

$$
\begin{aligned}
(\nabla^2\varphi^\dagger)\varphi &= \nabla\big((\nabla\varphi^\dagger)\varphi\big) - (\nabla\varphi^\dagger)(\nabla\varphi) = \nabla\big(\nabla(\varphi^\dagger\varphi) - \varphi^\dagger\nabla\varphi\big) - (\nabla\varphi^\dagger)(\nabla\varphi) \\
&= \nabla\big(\nabla(\varphi^\dagger\varphi)\big) - 2(\nabla\varphi^\dagger)(\nabla\varphi) - \varphi^\dagger(\nabla^2\varphi)\,.
\end{aligned}
$$

Außerdem kann man aus der obigen Rechnung bei (+) entnehmen, dass

$$
\begin{aligned}
\varrho &= \|\varphi\|^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\sum_{i=1}^3\sum_{j=1}^3\left(\partial_i\varphi^\dagger\delta_{ij}\partial_j\varphi + \mathrm{i}\sum_{k=1}^3\varepsilon_{ijk}\partial_i\varphi^\dagger\sigma_k\partial_j\varphi\right) \\
&= \|\varphi\|^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\sum_{i=1}^3\sum_{j=1}^3\left(\partial_i\varphi^\dagger\partial_i\varphi - \mathrm{i}\sum_{k=1}^3\varepsilon_{kji}\partial_i\varphi^\dagger\sigma_k\partial_j\varphi\right) \\
&= \|\varphi\|^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}(\nabla\varphi^\dagger)(\nabla\varphi) - \frac{\mathrm{i}\hbar^2}{4m^2c^2}\sum_{i=1}^3\partial_i\varphi^\dagger\underbrace{\left(\sum_{j=1}^3\sum_{k=1}^3\varepsilon_{kji}\sigma_k\partial_j\varphi\right)}_{=(\sigma\times\nabla\varphi)_i} \\
&= \|\varphi\|^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\|\nabla\varphi\|^2 - \frac{\mathrm{i}\hbar^2}{4m^2c^2}\nabla\cdot\left(\varphi^\dagger(\sigma\times\nabla\varphi)\right)\,.
\end{aligned}
$$

Man sieht, die beiden Wahrscheinlichkeitsdichten unterscheiden sich:

$$
\begin{aligned}
\|\varphi_s\|^2 &= \|\varphi\|^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\|\nabla\varphi\|^2 - \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla\cdot\left(\nabla\|\varphi\|^2\right) \\
\varrho &= \|\varphi\|^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\|\nabla\varphi\|^2 - \frac{\mathrm{i}\hbar^2}{4m^2c^2}\nabla\cdot\left(\varphi^\dagger(\sigma\times\nabla\varphi)\right)
\end{aligned}
$$

Allerdings ist der Unterschied die Divergenz eines Stroms. Bei Integration über ein Volumen mit geeigneten Randbedingungen (z.B. *no flux* oder periodischen R.B.) liefern beide Dichten dasselbe Ergebnis – sofern sie nur mit ortsunabhängigen Operatoren multipliziert werden.

(e) Zur Bestimmung des Hamiltonoperators in der Schrödingergleichung für φ_s setzen wir dessen Definition ein und formen um:

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi_s = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\varphi &= \left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi \\
&\underset{(11.4)}{=} \left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)H'\varphi \\
&= \left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)H'\left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)^{-1}\varphi_s \\
&= \left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)H'\left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\varphi_s + \mathcal{O}\left(\frac{1}{c^4}\right) \\
&= H\varphi_s + \mathcal{O}\left(\frac{1}{c^4}\right).
\end{aligned}$$

Damit ist die Gleichung (11.5) und die darin auftretende Darstellung des Hamiltonoperators H gezeigt.

Um nun die detaillierte Form (11.6) zu zeigen, werten wir das Produkt bis zur Ordnung $\mathcal{O}\left(c^{-2}\right)$ aus.

$$\begin{aligned}
H &= \left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)H'\left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right) \\
&= \left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\left\{\left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}\right)\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+q\Phi\right)+\frac{q}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma p})\,\Phi\,(\boldsymbol{\sigma p})\right\} \\
&\qquad \times\left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right) \\
&= \left\{\left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}-\frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}+\mathcal{O}\left(1/c^4\right)\right)\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+q\Phi\right)+\frac{q}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma p})\,\Phi\,(\boldsymbol{\sigma p})\right\} \\
&\qquad \times\left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right) \\
&= \left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}+\mathcal{O}\left(1/c^4\right)\right)\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+q\Phi\right)\left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)+\frac{q}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma p})\,\Phi\,(\boldsymbol{\sigma p}) \\
&= \left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+q\Phi-\frac{\boldsymbol{p}^4}{16m^3c^2}-\frac{q}{8m^2c^2}\boldsymbol{p}^2\Phi\right)\left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)+\frac{q}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma p})\,\Phi\,(\boldsymbol{\sigma p}) \\
&= \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+q\Phi-\frac{\boldsymbol{p}^4}{16m^3c^2}-\frac{q}{8m^2c^2}\boldsymbol{p}^2\Phi-\frac{\boldsymbol{p}^4}{16m^3c^2}-\frac{q}{8m^2c^2}\Phi\boldsymbol{p}^2 \\
&\qquad\qquad +\frac{q}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma p})\,\Phi\,(\boldsymbol{\sigma p}) \\
&= \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+q\Phi-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}-\frac{q}{8m^2c^2}\left(\boldsymbol{p}^2\Phi+\Phi\boldsymbol{p}^2\right)+\frac{q}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma p})\,\Phi\,(\boldsymbol{\sigma p})+\mathcal{O}\left(1/c^4\right).
\end{aligned} \tag{11.16}$$

Hierbei haben wir ausgenützt, dass der den Spinoperator enthaltende Term schon $\mathcal{O}\left(c^{-2}\right)$ ist und deshalb durch die beiden an H' heranmultiplizierten Faktoren gar nicht verändert wird.

Um den erhaltenen Ausdruck weiter zu vereinfachen, betrachten wir die Wirkung der beiden letzen Terme auf einen „Testspinor“ ψ gesondert:

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{p}^2, \Phi]_+\psi &= \boldsymbol{p}^2\Phi\psi + \Phi\boldsymbol{p}^2\psi = -\hbar^2\nabla^2(\Phi\psi) - \hbar^2\Phi\nabla^2\psi \\ &= -\hbar^2(\Delta\Phi)\psi - 2\hbar^2(\nabla\Phi)(\nabla\psi) - 2\hbar^2\Phi\Delta\psi \\ &= -\hbar^2(\Delta\Phi)\psi - 2\mathrm{i}\hbar(\nabla\Phi)(\boldsymbol{p}\psi) - 2\hbar^2\Phi\Delta\psi\,,\end{aligned}$$

und wir führen mittels $\boldsymbol{E} = -\nabla\Phi$ das elektrische Feld ein, so dass $\Delta\Phi = -\nabla\cdot\boldsymbol{E}$, was

$$-\frac{q}{8m^2c^2}\left(\boldsymbol{p}^2\Phi + \Phi\boldsymbol{p}^2\right) = -\frac{\hbar^2 q}{8m^2c^2}\nabla\cdot\boldsymbol{E} - \frac{\mathrm{i}\hbar q}{4m^2c^2}\boldsymbol{E}\boldsymbol{p} - \frac{q}{4m^2c^2}\Phi\boldsymbol{p}^2 \tag{11.17}$$

liefert. Ferner gilt

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\,\Phi\,(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\,\psi &= -\hbar^2(\boldsymbol{\sigma}\nabla)\,\Phi\,(\boldsymbol{\sigma}\nabla)\,\psi \\ &= -\hbar^2(\boldsymbol{\sigma}[\nabla\Phi])(\boldsymbol{\sigma}\nabla)\psi - \hbar^2\Phi(\boldsymbol{\sigma}\nabla)^2\psi \\ &= \mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{E})(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\psi + \Phi(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})^2\psi\,,\end{aligned}$$

was wir mithilfe von $(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p}) = \boldsymbol{p}^2$ und $(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{E})(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p}) = \boldsymbol{E}\boldsymbol{p} + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{p})$ weiter vereinfachen können:

$$\frac{q}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p})\,\Phi\,(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{p}) = \frac{q}{4m^2c^2}\Phi\boldsymbol{p}^2 + \frac{\mathrm{i}\hbar q}{4m^2c^2}\boldsymbol{E}\boldsymbol{p} - \frac{\hbar q}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{p})\,. \tag{11.18}$$

Man sieht, dass bei der Addition von (11.17) und (11.18) die beiden letzten Terme von (11.17) gerade die beiden ersten von (11.18) kompensieren. Nach Einsetzen in (11.16) erhalten wir das gewünschte Ergebnis:

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + q\Phi - \frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2} - \frac{q\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{p}) - \frac{q\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla\cdot\boldsymbol{E}\,.$$

Der Dispersionsterm (das ist der Term $\propto \boldsymbol{p}^4$) beschreibt die relativistische Korrektur der kinetischen Energie; man erhält ihn beim Entwickeln der relativistischen Energiedispersionsrelation als Folgeterm der klassischen kinetischen Energie:

$$E = \left(m^2c^4 + \boldsymbol{p}^2c^2\right)^{1/2} = mc^2\underbrace{\sqrt{1 + \frac{\boldsymbol{p}^2}{m^2c^2}}}_{\sqrt{1+x^2}\approx 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{2\cdot 4}x^2} \approx mc^2 + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}\,.$$

In einem radialsymmetrischen Feld ist $\boldsymbol{E}\parallel\boldsymbol{r}$. Der (auf den Dispersionsterm folgende) Spin-Bahn-Term beschreibt die Kopplungsenergie zwischen dem Spin $\hbar\sigma/2$ und dem Bahndrehimpuls $\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ aufgrund des Magnetfeldes, das das elektrische Feld des Kerns im bewegten Bezugssystem des Elektrons erzeugt. Wenn man „klassisch“ das Magnetfeld aus dem elektrischen Feld des Kernes, den das Elektron umkreist, gemäß $\boldsymbol{B} = -v/c\times\boldsymbol{E}$ berechnet, würde man einen um den Faktor 2 größeren Ausdruck erhalten. Die Wechselwirkung zwischen Spin und Bahn ist definiert mit

$$-\frac{g_s q}{2mc}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B} = \frac{q}{mc^2}\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{E}) = -\frac{q}{m^2c^2}\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{p}) = -\frac{q\hbar}{2m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{p})\,.$$

Dies lässt sich verstehen, wenn man berücksichtigt, dass das Bezugssystem des Elektrons kein Inertialsystem ist, was bedeutet, dass der Effekt der *Thomas-Präzession* (Spinpräzession im nicht mitbewegten Inertialsystem) auftritt.

Der Darwin-Term ist eine Folge der Zitterbewegung des Elektrons.

Die Lösungen zu den Aufgaben im Teil A werden zu dem unten genannten Termin hochgeladen.

Teil B

8. Zwei-Spin-System **6 Pkt.**

Der Hamiltonoperator eines Systems aus zwei Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen sei durch

$$H = \frac{a}{\hbar}\left(S_z^{(1)} + S_z^{(2)}\right) + \frac{4b}{\hbar^2}\boldsymbol{S}^{(1)} \cdot \boldsymbol{S}^{(2)}$$

gegeben. Hierbei sind a und b positive, reelle Konstanten und $\boldsymbol{S}^{(1)}$ bzw. $\boldsymbol{S}^{(2)}$ sind die Spinoperatoren zum ersten Spin (1) bzw. zweiten Spin (2), d.h. Drehimpulsoperatoren zur Quantenzahl $l = 1/2$. Berechnen Sie die *Eigenwerte* von H und geben Sie die zugehörigen *Eigenvektoren* im Basissystem der Eigenzustände

$$|m_1 m_2\rangle \equiv |m\rangle^{(1)} |m\rangle^{(2)}$$

von $\left(\boldsymbol{S}^{(1)}\right)^2$, $\left(\boldsymbol{S}^{(2)}\right)^2$, $S_z^{(1)}$ und $S_z^{(2)}$ an. Für welches Verhältnis a/b tritt Entartung auf?

Hinweis: Eine Möglichkeit die Aufgabe lösen ist es, den Spinoperator als

$$\boldsymbol{S}^{(i)} = S_x^{(i)}\boldsymbol{e}_x + S_y^{(i)}\boldsymbol{e}_y + S_z^{(i)}\boldsymbol{e}_z$$

aufzufassen. Über die Darstellung des Spinoperators mit den Pauli-Matrizen kann man zunächst die Eigenzustände $|m\rangle^{(i)}$ von $S_z^{(i)}$ für ein System mit einem Spin bestimmen. Die Eigenzustände für das Zwei-Spin-System sind die Produktzustände $|m_1 m_2\rangle$. Die Matrixdarstellung von H wird dann über seine Wirkung auf $|m_1 m_2\rangle$ berechnet.

Alternativ kann man auch zum Gesamtspin $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}^{(1)} + \boldsymbol{S}^{(2)}$ übergehen und ausrechnen, wie die gemeinsamen Eigenvektoren $|S, M\rangle$ von $\left(\boldsymbol{S}^{(1)}\right)^2$, $\left(\boldsymbol{S}^{(2)}\right)^2$, $\boldsymbol{S}^2$ und S_z im Basissystem der $|m_1 m_2\rangle$ aussehen.

Lösung: Wir wollen zunächst den konzeptionell einfacheren Weg betrachten. Hierzu müssen wir uns zunächst klar machen, wie die Komponenten des Spinoperators auf die Eigenzustände von H, $\boldsymbol{S}^2$ und S_z wirken. Wir betrachten also erstmal nur einen Spin. Für die Komponenten des Spins kennen wir die Darstellung mittels der Pauli-Matrizen:

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \qquad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

In dieser Darstellung sind die beiden Eigenvektoren

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \quad (m=+1) \qquad \text{und} \qquad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \quad (m=-1)\,.$$

Damit erhalten wir also

$$\begin{aligned} S_x\,|\uparrow\rangle &= \frac{\hbar}{2}\,|\downarrow\rangle & S_y\,|\uparrow\rangle &= +\mathrm{i}\frac{\hbar}{2}\,|\downarrow\rangle & S_z\,|\uparrow\rangle &= +\frac{\hbar}{2}\,|\uparrow\rangle \\ S_x\,|\downarrow\rangle &= \frac{\hbar}{2}\,|\uparrow\rangle & S_y\,|\downarrow\rangle &= -\mathrm{i}\frac{\hbar}{2}\,|\uparrow\rangle & S_z\,|\downarrow\rangle &= -\frac{\hbar}{2}\,|\downarrow\rangle \end{aligned} \tag{8.1}$$

Um nun das System aus beiden Spins zu beschreiben, wählen wir die (natürliche) Basis

$$|\beta_1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \qquad |\beta_2\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle \qquad |\beta_3\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle \qquad |\beta_4\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$$

Wir stellen fest, dass diese Basis orthonormiert ist, was die Berechnung der Matrixdarstellung von H vereinfacht. Wir schreiben H aus

$$H = \frac{a}{\hbar}\left(S_z^{(1)} + S_z^{(2)}\right) + \frac{4b}{\hbar^2}\left(S_x^{(1)}S_x^{(2)} + S_y^{(1)}S_y^{(2)} + S_z^{(1)}S_z^{(2)}\right)$$

und lesen die Wirkung auf unsere Basisvektoren ab:

$$\begin{aligned} H\,|\beta_1\rangle &= (b+a)\,|\beta_1\rangle & H\,|\beta_2\rangle &= 2b\,|\beta_3\rangle - b\,|\beta_2\rangle \\ H\,|\beta_3\rangle &= 2b\,|\beta_2\rangle - b\,|\beta_3\rangle & H\,|\beta_4\rangle &= (b-a)\,|\beta_4\rangle \end{aligned}$$

Als Matrix geschrieben lautet der Hamiltonoperator also

$$H^{\{\beta\}} = \begin{pmatrix} b+a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -b & 2b & 0 \\ 0 & 2b & -b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b-a \end{pmatrix}$$

Wegen der speziellen Form können wir die zwei Eigenwerte

$$\lambda_1 = b+a \qquad \text{und} \qquad \lambda_4 = b-a$$

und die zugehörigen Eigenvektoren

$$|\alpha_1\rangle = |\beta_1\rangle \qquad \text{und} \qquad |\alpha_4\rangle = |\beta_4\rangle$$

ablesen. Die anderen ergeben sich, da in der zweiten und dritten Zeile der erste und vierte Eintrag Null sind, aus

$$0 = \begin{vmatrix} -(b+\lambda) & 2b \\ 2b & -(b+\lambda) \end{vmatrix} = (b+\lambda)^2 - 4b^2 \qquad \Longrightarrow \qquad \begin{aligned} \lambda_2 &= -3b \\ \lambda_3 &= b \end{aligned}$$

Die verbleibenden normierten Eigenvektoren ergeben sich zu

$$|\alpha_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\beta_2\rangle - |\beta_3\rangle\right) \qquad \text{und} \qquad |\alpha_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\beta_2\rangle + |\beta_3\rangle\right)\,.$$

Da a und b echt größer Null sein sollten, kann Entartung nur bei

$$\lambda_2 = \lambda_4 \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{a}{b} = 4$$

auftreten.

Kommen wir nun zur etwas „komplizierteren" Rechnung. Hierzu erinnern wir uns zunächst, dass ein allgemeiner Drehimpuls $\boldsymbol{J}$ in der Quntenmechanik durch

$$[\,\boldsymbol{J}, J_j\,] = 0 \qquad \text{und} \qquad [\,J_j, J_k\,] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{jkl}J_l$$

definiert ist. Da die beiden Spins $\boldsymbol{S}^{(1)}$ und $\boldsymbol{S}^{(2)}$ diese Eigenschaften erfüllen, wird dies auch für den Gesamtspin

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}^{(1)} + \boldsymbol{S}^{(2)}$$

gelten. Somit gelten o.B.d.A. die folgenden Eigenwertgleichungen

$$\boldsymbol{S}^2 \left|S, M\right\rangle = S(S+1)\hbar^2 \left|S, M\right\rangle \qquad \text{und} \qquad S_z \left|S, M\right\rangle = M\hbar \left|S, M\right\rangle \;, \tag{8.2}$$

wobei S und M die beiden Quantenzahlen zur Beschreibung von $\boldsymbol{S}$ sind und erstmal die Werte

$$S = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots \qquad \text{und} \qquad M = -S, -S+1, \ldots S-1, S$$

annehmen könnten. Um diese weiter einzuschränken, entwickeln wir die Eigenvektoren aus (8.2) in der „alten" Basis

$$\left|S, M\right\rangle = \sum_{m_1}\sum_{m_2} \left\langle m_1 m_2 \,|\, S, M\right\rangle \left|m_1 m_2\right\rangle \;. \tag{8.3}$$

Wegen

$$S_z \left|m_1 m_2\right\rangle = (m_1 + m_2)\hbar \left|m_1 m_2\right\rangle$$

erhalten wir aus (8.2) und (8.3)

$$0 = \sum_{m_1}\sum_{m_2} \hbar(M - m_1 - m_2) \left\langle m_1 m_2 \,|\, S, M\right\rangle \left|m_1 m_2\right\rangle \;.$$

Da die $\left|m_1 m_2\right\rangle$ linear unabhängig sind, führt uns das direkt auf

$$\left\langle m_1 m_2 \,|\, S, M\right\rangle = 0 \qquad \text{für} \quad m_1 + m_2 \neq M\,.$$

Wir halten fest, dass die neuen Eigenvektoren sich immer nur aus Zuständen zusammensetzen, für die

$$m_1 + m_2 = M$$

gilt. In unserem Fall ist der maximale Wert $M = 1$, weswegen es auch Zustände mit $S = 1$ geben muss. Da dies aber noch nicht genug Zustände (nur 3 statt 4) sind, muss es außerdem noch einen $S = 0$ Zustand geben. Allgemein gilt

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2\,.$$

Die in (8.3) auftretenden Koeffizienten $\langle m_1 m_2 \,|\, S, M\rangle$ werden als Clebsch-Gordan-Koeffizienten bezeichnet. Es ist möglich diese mit einer Rekursionsgleichung zu berechnen. Diese kann z.B. in „Theoretische Physik II" von Eckhard Rebhan nachgelesen werden. Mit ihnen erhalten wir nach Normierung die vier Eigenvektoren:

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\beta_2\rangle - |\beta_3\rangle\right) \qquad |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\beta_2\rangle + |\beta_3\rangle\right)$$
$$|1,1\rangle = |\beta_1\rangle \qquad |1,-1\rangle = |\beta_4\rangle$$

Der Zustand mit $S = 0$ wird als Singulett und die Zustände mit $S = 1$ werden als Triplett bezeichnet.

Jetzt müssen wir noch den Hamiltonoperator mit $\boldsymbol{S}$ und S_z ausdrücken und seine Eigenwerte berechnen. Wegen

$$\boldsymbol{S}^2 = \left(\boldsymbol{S}^{(1)} + \boldsymbol{S}^{(2)}\right)^2 = \underbrace{\left(\boldsymbol{S}^{(1)}\right)^2}_{=\frac{3}{4}\hbar^2} + 2\boldsymbol{S}^{(1)} \cdot \boldsymbol{S}^{(2)} + \underbrace{\left(\boldsymbol{S}^{(2)}\right)^2}_{=\frac{3}{4}\hbar^2} = \frac{3}{4}\hbar^2\mathbb{1} + 2\boldsymbol{S}^{(1)} \cdot \boldsymbol{S}^{(2)}$$

lautet H nun

$$H = \frac{a}{\hbar}S_z + \frac{2b}{\hbar^2}\boldsymbol{S}^2 - 3b\mathbb{1}\,.$$

Wie wir sehen, sind die gemeinsamen Eigenvektoren von $\boldsymbol{S}$ und S_z ebenfalls Eigenvektoren von H und es gilt

$$H\,|S,M\rangle = E_{S,M}\,|S,M\rangle \qquad \text{mit} \quad E_{S,M} = aM + 2bS(S+1) - 3b\,.$$

Wir erhalten also wieder die vier Energien:

$$E_{0,0} = -3b \qquad E_{1,-1} = -a + b \qquad E_{1,0} = b \qquad E_{1,1} = a + b$$

Anmerkung: Zur Berechnung der Eigenwerte sind die Clebsch-Gordan-Koeffizienten nicht nötig, dazu reicht es, den Hamiltonoperator mithilfe von S_z und $\boldsymbol{S}^2$ darzustellen. Die Eigenvektoren in der Form $|S,M\rangle$ erhält man dann auch sehr einfach. Zur Berechnung der Eigenvektoren in der Darstellung durch die $|\beta_i\rangle$ braucht man in diesem einfachen Fall auch nicht die Clebsch-Gordan-Koeffizienten nachzuschlagen. Man überlegt sich einfach für jedes der möglichen $|S,M\rangle$, welche (maximal zwei) $|\beta_i\rangle$ die Bedingung $m_1 + m_2 = M$ erfüllen und setzt die passende Linearkombination in die Gleichung $H\,|S,M\rangle = E_{S,M}\,|S,M\rangle$ ein, um die Koeffizienten der Linearkombination zu erhalten. In den Fällen $|S,M\rangle = |1,1\rangle$ und $|S,M\rangle = |1,-1\rangle$ ist nicht einmal das notwendig, denn dort besteht die Linearkombination nur aus einem Term und es reicht, die Normierung nachzuprüfen.

Im Teil B können **6 Punkte** erreicht werden. Die Abgabe der Aufgabe(n) bis zum unten genannten Datum bitte per Mail an **antonia.schulz@ovgu.de**.