

Ausgangspunkt (ersalvt!)

Dirac-Gl. für den "grossen" Spinor ψ_1 (Zweier-Vektor), $\underline{A} = 0$, $\phi \neq 0$

$$\tilde{\psi}_1(r,t) = \psi_1(r) e^{-iEt/\hbar}$$

$$\left[E \psi_1(r) = \frac{c \hat{\sigma} \cdot \hat{p}}{2m_0 c^2} \cdot \frac{1}{\left(1 + \frac{E - q\phi(r)}{2m_0 c^2}\right)} c (\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) \psi_1(r) + q\phi \psi_1(r) \right]$$

Stationäre Gleichung!

$E = E_{\text{voll}} - m_0 c^2$ Relativistische Energie müsste hergeleitet werden!
 ↳ volle Teilchenenergie

elektrostatische Potential

Näherung: $\frac{E - q\phi}{2m_0 c^2} \ll 1$, Taylorentwicklung: $(1+x)^{-1} \approx 1 - x$ bis zum 1. Ordnung

(0.k-Ordnung führt auf den Pauli-Hamiltonian!)

$$\Rightarrow \left[(E - q\phi) \psi_1 + \frac{1}{4m_0^2 c^2} (\hat{\sigma} \cdot \hat{p})(E - q\phi)(\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) \psi_1 - \frac{1}{2m_0} (\hat{\sigma} \cdot \hat{p})^2 \psi_1 \right] = 0$$

setze im Folgenden: $K(r) = E - q\phi(r) = E - q\phi(r) = K(r)$ Zentralpotential

letzter Term in (*):

$$(\hat{\sigma} \cdot \hat{p})^2 = \hat{p}^2 + i \hat{\sigma} \cdot (\hat{p} \times \hat{p})$$

$$(\hat{\sigma} \cdot \underline{A})(\hat{\sigma} \cdot \underline{B}) = \underline{A} \cdot \underline{B} + i \hat{\sigma} \cdot (\underline{A} \times \underline{B})$$

Offensichtlich: $\hat{p}_i \sim \epsilon_{ijk} (\partial_j \partial_k - \partial_k \partial_j) = 0!$
i-te Komponente

$$\left[K(r) - \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + \frac{1}{4m_0^2 c^2} (\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) K(r) (\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) \right] \psi_1(r) = 0$$

**

das sind Terme die herbei in der nicht-relativist. SG aufsteigen

relativistische Korrekturen!

Letzten Term auf der rechten Seite von (**)

$$\begin{aligned}
 (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}}) U(r) (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}}) &= \underbrace{[(\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}}), U(r)]}_{\text{Kommutator}} (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}}) + U(r) \underbrace{(\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}})^2}_{\hat{p}^2} \quad \text{s. oben} \\
 &= \overbrace{(\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}}) U(r) (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}})}^{\text{Produktregel}} - U(r) (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}}) (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}}) + U(r) \hat{p}^2 \\
 &= (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}} \overrightarrow{U(r)}) (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}}) + \cancel{U(r) (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}}) (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}})} - \cancel{U(r) (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}}) (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}})} + U(r) \hat{p}^2 \\
 &= (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}} \tilde{U}(r)) (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}}) + U(r) \hat{p}^2
 \end{aligned}$$

benutze $U(r) = E - q\phi(r)$

Ortsdarstellung: $\hat{\underline{p}} U(r) = \frac{\hbar}{i} \nabla U(r) = -q \frac{\hbar}{i} \nabla \phi(r) = -q \hat{\underline{p}} \phi(r)$

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}}) U(r) (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}}) &= U(r) \hat{p}^2 - q (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}} \phi) (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{p}}) \\
 &= U(r) \hat{p}^2 - q (\hat{\underline{p}} \tilde{\phi}) \hat{p} - iq \hat{\underline{\sigma}} \cdot (\hat{\underline{p}} \tilde{\phi} \times \hat{\underline{p}})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \overbrace{(\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{A}}) (\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{B}})} \\
 &= \hat{\underline{A}} \cdot \hat{\underline{B}} + i \hat{\underline{\sigma}} \cdot (\hat{\underline{A}} \times \hat{\underline{B}}) \\
 & \hat{\underline{A}} \rightarrow \hat{\underline{p}} \phi \\
 & \hat{\underline{B}} \rightarrow \hat{\underline{p}}
 \end{aligned}$$

Einsetzen in (**)

$$\left(U(r) - \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + \frac{1}{4m_0^2 c^2} \left[U(r) \hat{p}^2 - q (\hat{\underline{p}} \tilde{\phi}) \hat{p} - iq \hat{\underline{\sigma}} \cdot (\hat{\underline{p}} \tilde{\phi} \times \hat{\underline{p}}) \right] \right) \psi_{\pm}(r) = 0$$

relativist. Korrekturen

(***)

Bemerkungen

- Im letzten Term auf der linken Seite "versteckt" sich bereits die Spin-Bahn-Kopplung!

Dem für ein Zentralpotential gilt:

$$\hat{\underline{p}} \phi(r) = \overbrace{\frac{\hbar}{i} \nabla \phi(r)}^{\text{Ortsdarstellung}} = \frac{\hbar}{i} \phi'(r) \cdot \frac{\underline{r}}{r} = \frac{1}{r} \frac{\hbar}{i} \phi'(r) \underline{r}$$

$\downarrow \frac{\partial \phi}{\partial r}$

$$\Rightarrow \frac{-iq}{4m_0^2 c^2} \hat{\sigma} \cdot (\hat{p} \phi \times \hat{p}) = \frac{-q \hbar}{4m_0^2 c^2} \frac{\phi'(r)}{r} \hat{\sigma} \cdot \underbrace{(\mathbf{n} \times \hat{p})}_{\substack{\text{Orientierung des} \\ \text{Drehimpulsoperators } \hat{L} !}}$$

$$= \frac{-q \hbar}{4m_0^2 c^2} \frac{\phi'(r)}{r} \hat{\sigma} \cdot \hat{L}$$

und $\hat{\sigma} = \frac{2}{\hbar} \hat{S}$ $\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}$

$$= -\frac{q}{2m_0^2 c^2} \frac{\phi'(r)}{r} \hat{S} \cdot \hat{L}$$

Man sieht: Die Rechnung (in 1. Ordnung bezgl. $\frac{E - q\phi}{2m_0 c^2}$) liefert eine systematische Herleitung der Spin-Bahn-Kopplung !!

- Man kann zeigen: Die beiden ersten (Korrekturen-)Terme in der eckigen Klammer sind jeder für sich nicht hermitisch! Zur Energie
Nur die Summe ist hermitisch (wie auch die Spin-Bahn-Kopplung)

Zu zeigen durch Betrachtung von Matrixelementen

$$\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle$$

falls $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ $= \langle \hat{A} \psi_1 | \psi_2 \rangle$
 $= \langle \psi_2 | \hat{A} | \psi_1 \rangle^*$

speziell: $\psi_2 = \psi_1$
 \Rightarrow Erwartungswert reell

- Weiterhin "Störpotentiale" der Gl. $\textcircled{**}$

Die Energie E bzw. $U(r) = E - q\phi(r)$ taucht einmal explizit im ersten Term und einmal als "Vorfaktor" von \hat{p}^2 auf

Man möchte also eine Gl. in der Form einer Eigenwertgl. haben, in der E nur explizit auftaucht!

Ansatz: Nähere E (bzw. U) durch den entsprechenden Ausdruck für das ("ungestörte") System ohne Relativität

nicht-relativist. $\hat{H}_0 | \varphi_0 \rangle = E | \varphi_0 \rangle$ mit $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + q\phi$ nicht-relativist. Hamiltonian

associated: $E = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + q\phi$

$$K = E - q\phi = \frac{\hat{p}^2}{2m_0}$$

(dasselbe würde man aus ~~der~~ erhalten, wenn man ~~die~~ alle relativistischen Korrekturen, d.h. $\frac{1}{c^2}$ [...] gleich Null setzt)

Benutze dies zur Auswertung der ersten beiden relativistischen Korrekturen in ~~(13)~~:

hier das Variablen $U(n) \hat{p}^2 - q(\hat{p} \cdot \vec{\phi}) \hat{p}$ (in Summe hermitisch, aber nicht einzeln)

Weg 1: Ersetze ~~das~~ $U(n) \hat{p}^2 \rightarrow \frac{\hat{p}^4}{2m_0}$, hermitescher Operator (da \hat{p} hermitisch)

Dann bleibt aber der nicht-hermitesche Operator $-q(\hat{p} \cdot \vec{\phi}) \hat{p}$ übrig!

Weg 2: siehe W.L. Kennedy, J. Phys. A.: Math. Gen. 21, 3021 (1988)

Vorgehensweise stattdessen:

Benutze die Approximation $K \rightarrow \frac{\hat{p}^2}{2m_0}$ nur im symmetrischen Anteil von $U \hat{p}^2$

$$\text{also: } U(n) \hat{p}^2 = \underbrace{\frac{1}{2}(U \hat{p}^2 + \hat{p}^2 U)}_{\text{Symmetrischer Anteil}} + \frac{1}{2}(U \hat{p}^2 - \hat{p}^2 U)$$

ersetze hier $K = \frac{\hat{p}^2}{2m_0}$

$$\approx \frac{\hat{p}^4}{2m_0} + \frac{1}{2} \underbrace{(U \hat{p}^2 - \hat{p}^2 U)}_{\text{Kommutator}}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(k\hat{p}^2 - \hat{p}^2k) &= \frac{1}{2}[k, \hat{p}^2] \\ &= \frac{1}{2}(\hat{p}^2k + k\hat{p}^2 - \hat{p}^2k - k\hat{p}^2) \\ &= \frac{1}{2}(\hat{p}^2k + k\hat{p}^2 - \hat{p}^2k - k\hat{p}^2) \\ &= -\frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla k + k\frac{\hbar}{i}\nabla\right) \end{aligned}$$

benutze

$$[\hat{A}, \hat{B}^2] = [\hat{A}, \hat{B}] \hat{B} + \hat{B} [\hat{A}, \hat{B}]$$

$$[\hat{p}, k(r)] = \frac{\hbar}{i} \nabla k$$

also hier: $k(r)\hat{p}^2 = \frac{\hat{p}^4}{2m_0} - \frac{1}{2}(\hat{p}^2k + k\hat{p}^2) - \frac{1}{2}\hat{p} \frac{\hbar}{i} \nabla k$

im letzten Term wirkt \hat{p} nicht nur auf das Ergebnis von $\frac{\hbar}{i} \nabla k$, sondern auch auf die Wellenfunktion danach!

$$\begin{aligned} \Rightarrow k(r)\hat{p}^2 &= \frac{\hat{p}^4}{2m_0} - \frac{1}{2}(\hat{p}^2k + k\hat{p}^2) - \frac{1}{2}\hat{p} \frac{\hbar}{i} \nabla k \\ &= \frac{\hat{p}^4}{2m_0} - (\hat{p}^2k) \hat{p} - \frac{1}{2}\hat{p}^2k \end{aligned}$$

benutze noch: $\hat{p}k = -q\hat{p}\phi(r)$ $\hat{p}^2 \rightarrow -\hbar^2 \nabla^2$

$$\Rightarrow k(r)\hat{p}^2 = \frac{\hat{p}^4}{2m_0} + q(\hat{p}^2\phi) \hat{p} - \frac{1}{2}q\hbar^2 \nabla^2 \phi$$

Setze dies in $(*)$ ein. Man sieht: der Term $q(\hat{p}^2\phi) \hat{p}$ hebt sich heraus!
Wiederholte ☺

aus $(*)$

$$\left(E - q\phi(r) - \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + \frac{1}{4m_0^2c^2} \left[\frac{\hat{p}^4}{2m_0} - \frac{1}{2}q\hbar^2 \Delta \phi - iq\hat{\sigma} \cdot (\hat{p} \times \hat{p}) \right] \right) \psi(r) = 0$$

benutze noch: (schon gezeigt!) $\frac{iq\hat{\sigma} \cdot (\hat{p} \times \hat{p})}{4m_0^2c^2} = \frac{q\hbar}{4m_0^2c^2} \frac{\phi'(r)}{r} \hat{\sigma} \cdot \underline{\underline{1}}$

$$= \frac{q}{2m_0^2c^2} \frac{\phi'(r)}{r} \underline{\underline{1}}$$

Gesamtergebnis für die stationäre Gleichung (Eigenwertgleichung)

$$\hat{H} \psi_1(r) = E \psi_1(r), \quad E = E_{\text{rel}} - m_0 c^2$$

Hamiltonian mit den drei relativistischen Korrekturtermen.

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m_0}}_{\text{nicht-relativist. Anteil}} + q \phi(r) - \underbrace{\frac{\hat{p}^4}{8m_0^3 c^2}}_{\text{relativistische Korrekturterm!}} + \frac{q \hbar^2 \nabla^2 \phi}{8m_0^2 c^2} + \frac{q}{2m_0^2 c^2} \frac{\phi'(r)}{r} \hat{S} \cdot \hat{L}$$

Interpretation der Korrekturterme?

$$\hat{H}_{\text{rel}} \stackrel{\leftarrow \text{klassisch}}{=} - \frac{\hat{p}^4}{8m_0^3 c^2} \stackrel{\leftarrow \text{relativist.}}{}$$

Dieses ist konsistent mit der Taylor-Entwickl. der ^{klassisch} relativist. Energie-Impuls-Relation.

$$\begin{aligned} E &= \sqrt{m_0^2 c^4 + \hat{p}^2 c^2} = m_0 c^2 \sqrt{1 + \frac{\hat{p}^2}{m_0^2 c^2}} && \text{entwicke } (1+x)^{\frac{1}{2}} \\ &\approx m_0 c^2 \left(1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \dots \right) \\ &= m_0 c^2 \left(1 + \frac{\hat{p}^2}{2m_0^2 c^2} - \frac{1}{8} \frac{\hat{p}^4}{(m_0^2 c^2)^2} + \dots \right) \\ &= m_0 c^2 + \frac{\hat{p}^2}{2m_0} - \frac{1}{8} \frac{\hat{p}^4}{m_0^3 c^2} \end{aligned}$$