Ausgangspunkt (exakt!)

$\tilde{\varphi}_1(\underline{r},t) = \varphi_1(\underline{r})\, e^{-iEt/\hbar}$

Dirac-Gl. für den "grossen" Spinor φ_1 (Zweier-Vektor), $\underline{A}=0$, $\phi \neq 0$

$$\boxed{E\,\varphi_1(\underline{r}) = \frac{c\,\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}}{2m_0c^2}\cdot\frac{1}{\left(1+\frac{E-q\phi(\underline{r})}{2m_0c^2}\right)}\,c(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\,\varphi_1(\underline{r}) + q\phi\,\varphi_1(\underline{r})}$$

elektrostatische Potential

Stationäre Gleichung!

$E = E_{voll} - m_0c^2$ Ruheenergie wurde bereits abgezogen!

volle Teilchenenergie

Näherung: $\underbrace{\frac{E-q\phi}{2m_0c^2}}_{x} \ll 1$, Taylorentwicklung: $(1+x)^{-1} \approx \underbrace{1}_{\text{0.te Ordnung}} - x$ bis zur 1. Ordnung

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

$$\Rightarrow \boxed{(E-q\phi)\,\varphi_1 + \frac{1}{4m_0^2c^2}(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})(E-q\phi)(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\,\varphi_1(\underline{r}) - \frac{1}{2m_0}(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})^2\,\varphi_1(\underline{r}) = 0} \quad (*)$$

setze im Folgenden: $K(\underline{r}) = E - q\phi(\underline{r}) \underset{\text{Zentralpotential}}{=} E - q\phi(r) = K(r)$

letzter Term in (*):

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

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

Ortsdarstellung: i-te Komponente $A_i \sim \varepsilon_{ijk}(\partial_j\partial_k - \partial_k\partial_j) = 0$!

$$\boxed{\Big[\underbrace{K(r) - \frac{\hat{p}^2}{2m_0}}_{\text{das sind Terme, die bereits in der nicht-relativist. SG auftauchen}} + \underbrace{\frac{1}{4m_0^2c^2}(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\,K(r)(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})}_{\text{relativistische Korrektur!}}\Big]\varphi_1(\underline{r}) = 0} \quad (**)$$

Letzten Term auf der rechten Seite von (**)

$$(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\,K(r)\,(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}) = \underbrace{\left[\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}},\, K(r)\mathbb{1}\right]}_{\text{Kommutator}}(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}) + K(r)\underbrace{(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})^2}_{\hat{\underline{p}}^2}$$

s. oben

$$= (\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\,K(r)\,(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}) - K(r)(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}) + K(r)\,\hat{\underline{p}}^2$$

Produktregel

$$= (\hat{\underline{\sigma}}\cdot\widetilde{\hat{\underline{p}}K(r)})(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}) + \cancel{K(r)(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})}(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}) - \cancel{K(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})}(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}) + K(r)\,\hat{\underline{p}}^2$$

$$= (\hat{\underline{\sigma}}\cdot\widetilde{\hat{\underline{p}}K(r)})(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}) + K(r)\,\hat{\underline{p}}^2$$

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

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

$$\Rightarrow (\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\,K(r)\,(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}) = K(r)\,\hat{\underline{p}}^2 - q(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}\phi)(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})$$

$$= K(r)\,\hat{\underline{p}}^2 - q(\widetilde{\hat{\underline{p}}\phi})\cdot\hat{\underline{p}} - iq\,\hat{\underline{\sigma}}\cdot(\widetilde{\hat{\underline{p}}\phi}\times\hat{\underline{p}})$$

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

Einsetzen in (**)

$$\boxed{\left(K(r) - \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m_0} + \underbrace{\frac{1}{4m_0^2c^2}\left[K(r)\,\hat{\underline{p}}^2 - q(\widetilde{\hat{\underline{p}}\phi})\hat{\underline{p}} - iq\,\hat{\underline{\sigma}}\cdot(\widetilde{\hat{\underline{p}}\phi}\times\hat{\underline{p}})\right]}_{\text{relativist. Korrektur}}\right)\varphi_1(\underline{r}) = 0}$$

(***)

Bemerkungen

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

Denn für ein Zentralpotential gilt:

$$\hat{\underline{p}}\,\phi(r) \overset{\text{Ortsdarstellung}}{=} \frac{\hbar}{i}\nabla\phi(r) = \frac{\hbar}{i}\underbrace{\phi'(r)}_{\frac{\partial\phi}{\partial r}}\cdot\frac{\underline{r}}{r} = \frac{1}{r}\frac{\hbar}{i}\phi'(r)\,\underline{r}$$

$$\Rightarrow \frac{-iq}{4m_0^2c^2}\,\hat{\underline{\sigma}}\cdot\left(\hat{\underline{p}}\phi\times\hat{\underline{p}}\right) = -\frac{q\hbar}{4m_0^2c^2}\,\frac{\phi'(r)}{r}\,\hat{\underline{\sigma}}\cdot\underbrace{\left(\underline{r}\times\overbrace{\frac{\hbar}{i}\nabla}^{\hat{\underline{p}}}\right)}_{\text{Ortsdarstellung des Drehimpulsoperators } \hat{\underline{L}}\ !}$$

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

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

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

Man sieht: Die Rechnung (in 1. Ordnung bezgl. $\frac{E-q\phi}{2m_0c^2}$) liefert eine <u>systematische</u> Herleitung der Spin-Bahn-Kopplung !!

- Man kann zeigen: Die beiden ersten (Korrektur-)Terme (zur Energie) in der eckigen Klammer sind jeder für sich <u>nicht hermitesch</u>! Nur die Summe ist hermitesch (wie auch die Spin-Bahn-Kopplung)

Zu Zeigen durch Betrachtung von Matrixelementen

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

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

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

Speziell: $\psi_2=\psi_1$

$\Rightarrow$ Erwartungswert reell

- Weiterer "Schönheitsfehler" der Gl. (**)

Die Energie E bzw $K(r) = E - q\phi(r)$ 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!

Ausweg: Nähere E (bzw. K) durch den entsprechenden Ausdruck für das ("ungestörte") System ohne Relativistik 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

assoziiere: $E = \frac{\hat{p}^2}{2m} + q\phi$

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

(dasselbe würde man aus (**) erhalten, wenn man ~~ob~~ alle relativistischen Korrekturen, d.h. $\frac{1}{4m_0^2c^2}[\ldots]$ gleich Null setzt)

Benutze dies zur Auswertung der ersten beiden relativistische Korrekturterme in (**):

hier ohne Vorfaktor)

$$K(r)\hat{p}^2 - q(\hat{p}\phi)\hat{p}$$ (in Summe hermitesch, aber nicht einzeln)

Weg 1: ~~Ersetze~~ ~~Terme~~ $K(r)\hat{p}^2 \longrightarrow \frac{\hat{p}^4}{2m_0}$, hermitescher Operator (da $\hat{p}$ hermitesch)

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

Weg 2: siehe W. L. Kennedy, J. Phys. A.: Math. Gen. $\underline{21}$, 3021 (1988)

Vorgehensweise stattdessen:

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

also: $$K(\underline{r})\hat{p}^2 = \underbrace{\frac{1}{2}(K\hat{p}^2 + \hat{p}^2K)}_{\substack{\text{symmetrischer Anteil} \\ \text{ersetze hier } K = \frac{\hat{p}^2}{2m_0}}} + \frac{1}{2}(K\hat{p}^2 - \hat{p}^2K)$$

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

$$\frac{1}{2}\left(K\hat p^2 - \hat p^2 K\right) = \frac{1}{2}\left[K,\hat p^2\right]$$
$$= \frac{1}{2}\left([K,\hat p]\cdot\hat p + \hat p\,[K,\hat p]\right)$$
$$= -\frac{1}{2}\left([\hat p,K]\cdot\hat p + \hat p\,[\hat p,K]\right)$$
$$= -\frac{1}{2}\left(\left(\frac{\hbar}{i}\nabla K\right)\hat p + \hat p\,\frac{\hbar}{i}\nabla K\right)$$

benutze

$$[\hat A,\hat B\hat C] = [\hat A,\hat B]\hat C + \hat B[\hat A,\hat C]$$

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

also bisher: $K(r)\,\hat p^2 = \frac{\hat p^4}{2m_0} - \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla K\right)\hat p - \frac{1}{2}\,\hat p\,\frac{\hbar}{i}\nabla K(r)$

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

$$\Rightarrow K(r)\,\hat p^2 = \frac{\hat p^4}{2m_0} - \frac{1}{2}(\hat p K)\hat p - \frac{1}{2}(\hat p^2 K) - \frac{1}{2}(\hat p K)\hat p$$
$$= \frac{\hat p^4}{2m_0} - (\hat p K)\hat p - \frac{1}{2}(\hat p^2 K)$$

benutze noch: $\hat p K \overset{K = E - q\phi(r)}{=} -q\,\hat p\,\phi(r)$ $\qquad \hat p^2 \to -\hbar^2 \underbrace{\nabla^2}_{\Delta}$

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

Setze dies in (**) ein. Man sieht: der nichthermitischen Term $q(\hat p\phi)\hat p$ hebt sich heraus!

aus (**)

$$\left(E - q\phi(r) - \frac{\hat p^2}{2m_0} + \frac{1}{4m_0^2c^2}\left[\frac{\hat p^4}{2m_0} - \frac{1}{2}q\hbar^2\Delta\phi - iq\,\hat{\underline\sigma}\cdot(\hat p\phi\times\hat p)\right]\right)\cdot\underline{\varphi}_1(r) = 0$$

benutze noch:
(schon gezeigt!)

$$\frac{iq\,\hat{\underline\sigma}\cdot(\hat p\phi\times\hat p)}{4m_0^2c^2} = \frac{q\hbar}{4m_0^2c^2}\,\frac{\phi'(r)}{r}\,\hat{\underline\sigma}\cdot\underline{L}$$
$$= \frac{q}{2m_0^2c^2}\,\frac{\phi'(r)}{r}\,\hat{\underline S}\cdot\underline{L}$$

Gesamtergebnis für die stationäre Gleichung (Eigenwertgleichung)

$$\hat{H}\,\varphi_1(\underline{r}) = E\,\varphi_1(\underline{r}) \quad , \quad E = E_{rel} - m_0 c^2$$

Hamiltonian mit den drei relativistische Korrekturtermen.

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

Interpretation der Korrekturterme ?

$$\hat{H}_{rel}^{kin} = -\frac{\hat{p}^4}{8m_0^3c^2}$$

kin ← kinetisch, rel ← relativist.

Dies ist konsistent mit der Taylor-Entwickl. der klassisch relativist. Energie-Impuls-Relation.

$$E = \sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2} = m_0c^2\sqrt{1 + \underbrace{\frac{p^2}{m_0^2c^2}}_{x}}$$

entwickle $(1+x)^{\frac{1}{2}}$

$$\approx m_0c^2\left(1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \ldots\right.$$

$$= m_0c^2\left(1 + \frac{p^2}{2m_0^2c^2} - \frac{1}{8}\frac{p^4}{(m_0^2c^2)^2} + \ldots\right.$$

$$= m_0c^2 + \frac{p^2}{2m_0} - \frac{1}{8}\frac{p^4}{m_0^3c^2}$$