Zitterbewegung und Darwin-Term.

Ausgehend von Dirac-Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = [c \cdot \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2]\psi$$

$$\boxed{\begin{array}{c}\text{Clifford-Algebra}\\ \alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 2\,\delta_{ij}\\ \alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0\\ \beta^2 = 1\end{array}}$$

Zunächst Bewegungsgleichung für freies Teilchen $\langle x \rangle$:

Pauli-Darstellung

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} \emptyset & \sigma_i \\ \sigma_i & \emptyset \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & \emptyset \\ \emptyset & -\mathbb{I} \end{pmatrix}$$

$$-i\hbar \frac{\partial \langle x \rangle}{\partial t} = [H, \langle x \rangle]$$

$$-i\hbar \frac{\partial \langle x \rangle}{\partial t} = c \cdot \alpha_i p_i \langle x \rangle \qquad p_i = -i\hbar\partial_i$$

$$\frac{\partial x_j}{\partial t} = c \cdot \alpha_i \delta_{ij} \qquad \frac{\partial x_j}{\partial t} = c \cdot \alpha_j(t)$$

$$\alpha_j(t) = e^{i\frac{Ht}{\hbar}} \alpha_j \, e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}$$

$$\underline{-i\hbar\frac{\partial \alpha_j(t)}{\partial t}} = H\alpha_j(t) - \alpha_j(H) = \underline{2 \cdot [c\alpha_\ell p_\ell + \beta mc^2]\,\alpha_j(t)} - \underline{2 \cdot c p_j}$$

$$\alpha_j(t) = \underline{[H^{-1}] c p_j} + \underline{e^{+i\frac{2Ht}{\hbar}}} [\alpha_0 - [H^{-1}] c p_j]$$

$$\frac{\partial x_j}{\partial t} = c^2 [H^{-1}] p_j + c e^{+i\frac{2Ht}{\hbar}} [\alpha_j - H^{-1} c p_j]$$

$$x_j(t) = x_j(0) + \frac{c^2 p_j}{E} t + \frac{\hbar c \, e^{i\frac{2Ht}{\hbar}}}{i 2E} \underbrace{\left[\alpha_j - \frac{c p_j}{E}\right]}$$

$x_j(0)$ → Vernünftig

$\frac{c^2 p_j}{E} t$ → Erwartet

→ Oszillation?

$\left[\alpha_j - \frac{c p_j}{E}\right]$ → Vektoroperator → Oszillation mit Compton-λ

→ Teilchen in Bereich mit Radius $\frac{\hbar c}{2E}$ verschmiert → Potential-Mittelwert-betrachtung

Potential-Mittelwert mit Verschmierung →

$$V(r+\Delta r) = V(r) + \Delta r_i \, \partial_i (V(r)) + \frac{1}{2} \cdot \Delta r_i \Delta r_j \, \partial_i \partial_j \, V(r)$$

ungerade in Δr → verschwindet mit Verschmierung

ungerade falls $i \neq j$ → nur $\frac{1}{2} \, \partial_i \partial_i \, V(r) \cdot \langle \Delta r^2 \rangle$ bleibt

Oszillation mit Amplitude $\frac{\hbar c}{2E}$ → $rms = \frac{\hbar c}{\sqrt{2}\,2E}$

⇝ Energiebeitrag $\sim \frac{1}{16} \frac{\hbar^2 \alpha^8}{m^2 c^2} \Delta V$

Wenn Kreis-bahn → $rms = \frac{\hbar c}{2E}$

Dirac-Gleichung mit Potential

stationäre Zustände

$$E \cdot \bar{\Psi} = \left[c \cdot \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2\right] \bar{\Psi} + \cancel{\beta} V \bar{\Psi} \qquad \bar{\Psi} = \begin{pmatrix} \psi \\ \phi \end{pmatrix} \qquad \left[\begin{array}{l} E = mc^2 + \mathcal{E} \\ \mathcal{E} \ll mc^2 \end{array}\right.$$

$$\overset{\mathcal{E}\psi}{\cancel{E\psi}} = c \cdot \sigma_i p_i \phi + \cancel{mc^2 \psi} + V\psi$$

$$E\phi = c \cdot \sigma_i p_i \psi - mc^2 \phi + V\phi$$

$$(E + mc^2 - V)\phi = c \cdot \sigma_j p_j \psi \qquad \mathcal{E}\psi = c^2 \sigma_i p_i \left[\left(\frac{1}{E + mc^2 - V}\right) \sigma_j p_j \psi\right] + V\psi$$

$$\mathcal{E}\psi = \underbrace{c^2 \sigma_i \frac{(-1)}{(E + mc^2 - V)^2} p_i(-V)\, \sigma_j p_j \psi}_{-\frac{\hbar^2 c^2}{(E+mc^2-V)^2} \sigma_i \partial_i(V) \sigma_j \partial_j \psi} + c^2 \frac{1}{E + mc^2 - V} \underbrace{\sigma_i p_i \sigma_j p_j}_{} \psi + V\psi$$

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\delta_{ij} \mathbb{1}$$

$$\rightarrow \sigma_i \sigma_j p_i p_j = p_i p_i$$

↳ Erwartungswerte für gebundene Zstd.:

$$\int \psi^* \partial_i(V) \partial_j \psi \, dV$$

ψ^* & ψ entweder beide gerade oder ungerade für symmetrische Potentiale $\rightarrow \psi^* \partial_j \psi$ ungerade in (j)

$\partial_i(V)$ ist ungerade in (i) $\rightarrow$ falls $i \neq j \rightarrow \emptyset$

$$\mathcal{E}\psi = \sigma_i \sigma_j \left(-\frac{\hbar^2 c^2}{(2mc^2)^2} \partial_i(V) \partial_j(\psi)\right) \delta_{ij} + \underbrace{\frac{c^2}{2mc^2} p_i p_i \psi + V\psi}_{\text{Schrödinger-Gleichung-Beitrag}}$$

$$-\frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \partial_i(V) \partial_i(\psi) \rightarrow$$

Erwartungswert: $\displaystyle \int \psi^* \partial_i(V) \partial_i(\psi) \, dV = -\int \partial_i(\psi^*) \partial_i(V) \psi \, dV - \int \psi^* \partial_i \partial_i(V) \psi \, dV$

$$\int(\psi^* \partial_i(V) \partial_i(\psi)) \, dV + \int(\partial_i(\psi^*) \partial_i(V) \psi) \, dV = -\int \psi^* (\partial_i \partial_i(V)) \psi \, dV$$

Ersetzen →

$$-\frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \partial_i(V) \partial_i(\psi) \longmapsto +\frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \partial_i \partial_i(V) \psi = \text{Darwin Term}$$

Feine englische Art der Herleitung: Foldy-Wouthuysen transformation

Anwendung auf Wasserstoff:

$$E_n = -R_y \frac{1}{n^2} \qquad R_y = 13{,}6 \text{ eV}$$

$$E_D = \frac{2R_y^2}{mc^2}\frac{1}{n^3} \approx \frac{1}{1381} R_y \frac{1}{n^3}$$