3. PLENUM: Zitterbewegung & Darwin Term

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underset{\text{Viererspinor!}}{\psi} = \underbrace{\left[c\,\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m c^2\right]}_{\hat{H}_D}\underset{\text{Viererspinor!}}{\psi} \quad \text{mit} \begin{cases} \beta^2 = 1 \\ \alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0 \\ \alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 2\delta_{ij} \end{cases} \rightarrow \text{Clifford Algebra}$$

und $\alpha_i^+ = \alpha_i$; $\beta^+ = \beta$

a) Positionsoperator: $\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$ (Schrödinger Darstellung)

$$\vec{r}_H(t) = e^{\frac{i\hat{H}_D t}{\hbar}}\,\vec{r}_H\,e^{-\frac{i\hat{H}_D t}{\hbar}} \quad (\rightarrow \text{Heisenberg-Darstellung})$$

$$\Rightarrow\quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\vec{r}_H(t) = \left[\vec{r}_H(t), \hat{H}_D\right]$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{x}_i(t) = e^{\frac{i\hat{H}_D t}{\hbar}}\left[\hat{x}_i, \hat{H}_D\right]e^{-\frac{i\hat{H}_D t}{\hbar}} = e^{\frac{i\hat{H}_D t}{\hbar}}\left[\hat{x}_i, c\hat{\alpha}_j\hat{p}_j\right]e^{-\frac{i\hat{H}_D t}{\hbar}}$$

$$= e^{\frac{i\hat{H}_D t}{\hbar}}\,c\hat{\alpha}_j\underbrace{\left[\hat{x}_i, \hat{p}_j\right]}_{\rightarrow\, i\hbar\delta_{ij}}e^{-\frac{i\hat{H}_D t}{\hbar}} = i\hbar c\,\hat{\alpha}_i(t) \Rightarrow \boxed{\frac{\partial\hat{x}_i}{\partial t} = c\hat{\alpha}_i(t)} \qquad \text{(I)}$$

b) (II)

$$\frac{d\vec{r}_H(t)}{\partial t} = c\hat{\alpha}_i(t) \quad \text{mit} \quad \hat{\alpha}_i(t) = e^{\frac{i\hat{H}_D t}{\hbar}}\,\hat{\alpha}_i\,e^{-\frac{i\hat{H}_D t}{\hbar}}$$

$$\Rightarrow\quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[\hat{\alpha}_i(t)\right] = \left[\hat{\alpha}_i(t), \hat{H}_D\right] \quad (\rightarrow \text{Heisenberg-Bewegungsgleichung für } \vec{\alpha})$$

$$= e^{\frac{i\hat{H}_D t}{\hbar}}\left[\hat{\alpha}_i, \hat{H}_D\right]e^{-\frac{i\hat{H}_D t}{\hbar}} \rightarrow \hat{\alpha}_i\hat{H}_D = -\hat{H}_D\hat{\alpha}_i + \{H_D, \hat{\alpha}_i\}$$

$$\rightarrow \hat{\alpha}_i\hat{H}_D - \hat{H}_D\hat{\alpha}_i = -2\hat{H}_D\hat{\alpha}_i + c\hat{p}_j\underbrace{\{\hat{\alpha}_j, \hat{\alpha}_i\}}_{\rightarrow\, 2\delta_{ij}}$$

d.h.: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\alpha_i(t) + 2H_D\alpha_i(t) = 2cp_i$

$$\Rightarrow\quad \frac{\partial\hat{\alpha}_i(t)}{\partial t} - \underbrace{\frac{2i}{\hbar}\hat{H}_D}_{a}\cdot\hat{\alpha}_i(t) = \underbrace{-\frac{2ic\hat{p}_i}{\hbar}}_{g}$$

Lösung:

$$\alpha_i(t) = c\hat{p}_i\hat{H}_D^{-1} + e^{\frac{2i\hat{H}_D t}{\hbar}}\left[\hat{\alpha}(0) - c\hat{p}_i\hat{H}_D^{-1}\right]$$

Allgemeine Lösung für

$$\dot{y} + ay = g$$

$$y(t) = e^{-at}\left[c_1 + \int_0^t dt'\,g\,e^{at'}\right]$$

$$= e^{-at}\left[y(0) + g a^{-1}(e^{at} - 1)\right]$$

$$= g a^{-1} + e^{-at}\left[y(0) - g a^{-1}\right]$$

$$\frac{\partial \hat{x}_i(t)}{\partial t} = c\,\hat{\alpha}_i(t) = c^2 \hat{p}_i \hat{H}_D^{-1} + c\, e^{\frac{2i\hat{H}_D t}{\hbar}} \Big[\underbrace{\hat{\alpha}_i}_{=\hat{\alpha}_i(0)} - c\hat{p}_i \hat{H}_D^{-1}\Big]$$

$$\hat{x}_i(t) = \hat{x}_i(0) + \int_0^t dt' \, \frac{\partial \hat{x}_i(t')}{\partial t} =$$

$$= \hat{x}_i(0) + \left[c^2 \hat{p}_i \hat{H}_D^{-1}\right] t + c\left[\frac{\hbar}{2i\hat{H}_D}\right]\left[\alpha_i - c\hat{p}_i \hat{H}_D^{-1}\right] e^{\frac{2i\hat{H}_D t}{\hbar}}$$

p_i und $\hat{H}_D$ sind Bewegungskonstanten des freien Problems

↳ E mit $|E| = mc^2 + \varepsilon$; $\varepsilon \ll mc^2$

$$\hat{x}_i(t) = \hat{x}_i(0) + \underbrace{\left(\frac{c^2 p_i}{H_D}\right) t}_{\text{Klassische Bewegung}} + \underbrace{\left(\frac{\hbar c}{H_D}\right)\frac{1}{2i}\left[\alpha_i - \frac{c p_i}{H_D}\right] e^{\frac{2iH_D t}{\hbar}}}_{\text{Starke Oszillationen}}$$

• $\frac{cp_i}{E} \approx \frac{cp_i}{mc^2} = \frac{p_i}{m}$

→ Typische Länge: $\lambda_c = \frac{\hbar c}{E} \cong \underbrace{\frac{\hbar}{mc}}_{\text{Compton-Länge}} + O\left(\frac{v}{c}\right)$

→ Typisches Periode: $\tau = \frac{\hbar}{2E} \mathrel{\hat{=}} \frac{\hbar}{2mc^2}$

III

c) Wichtige Folge dieser schnellen Oszillationen (⇒ ZITTERBEWEGUNG):
Falls ein Elektron sich in einem externen (und ortsabhängigen) Potential $V(\vec{r})$ befindet wird es "effektiv" einen gemittelten Wert des Potentials $\overline{V}(\vec{r})$ spüren!

Ganz Konkret:

$$V(\vec{r}+d\vec{r}) = V(\vec{r}) + \vec{\nabla} V(\vec{r})\cdot d\vec{r} + \frac{1}{2}\sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} V(\vec{r})\, \delta x_i\, \delta x_j + \dots$$

$$\Rightarrow \overline{V(\vec{r})} = V(\vec{r}) + \left\langle V(\vec{r}+d\vec{r}) - V(\vec{r})\right\rangle$$

hier: Mittelung über die Länge der Zitterbew. (mit $\lambda_c = \frac{\hbar}{mc}$)

$$= V(\vec{r}) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 V(r)}{\partial x_i \partial x_j}\langle \delta x_i \partial x_j\rangle \longrightarrow \langle(\delta x_i)^2\rangle \delta_{ij} = \frac{1}{3}\langle(\delta r)^2\rangle \delta_{ij} = \frac{1}{3}\lambda_c^2 \delta_{ij}$$

$$= \overline{V}(\vec{r}) + \frac{1}{6}\left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2 \nabla^2 V \Rightarrow$$ Qualitative Abschätzung des DARWIN TERMS

IV

d) $$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\tilde{\varphi}\\ \tilde{\chi}\end{pmatrix} = c\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}\begin{pmatrix}\tilde{\chi}\\ \tilde{\varphi}\end{pmatrix} + V(r)\begin{pmatrix}\tilde{\varphi}\\ \tilde{\chi}\end{pmatrix} + mc^2\begin{pmatrix}\tilde{\varphi}\\ -\tilde{\chi}\end{pmatrix}$$

HIER: $\begin{pmatrix}\tilde{\varphi}\\ \tilde{\chi}\end{pmatrix} = e^{iEt}\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$ mit $\begin{cases}E = mc^2 + \varepsilon\\ \varepsilon \ll mc^2\end{cases}$ und $\vec{\pi} = \vec{p} - \cancel{\frac{q}{c}\vec{A}} \to \vec{p}$

(Wir sind hier nicht an der Kopplung mit einem magnetischen Feld interessiert)

$$\Rightarrow \varepsilon\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} = c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\begin{pmatrix}\chi\\ \varphi\end{pmatrix} + V(r)\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} - 2mc^2\begin{pmatrix}\emptyset\\ \chi\end{pmatrix}$$

$$\chi = \frac{c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{2mc^2+\varepsilon - V(r)}\varphi \;\Big|\Rightarrow\; \boxed{\varepsilon\varphi = c^2\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\left[\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{2mc^2+\varepsilon-V(r)}\right]\varphi + V(r)\varphi}$$

wie in der VO, wo wir aber $\varepsilon - V(r)$ im Nenner ganz vernachlässigt haben

IV

• Explizit: $-i\hbar\partial_i$

$$\varepsilon\varphi = \underbrace{c^2\sigma_i \overset{\Uparrow}{p_i}\left[\frac{1}{2mc^2+\varepsilon-V(r)}\right]\sigma_j p_j \varphi}_{} + V(r)\varphi \qquad \frac{c^2p^2}{[2mc^2+\varepsilon-V(r)]}\varphi \cong \left[\frac{p^2}{2m}+\dots\right]\varphi$$

$$= \underbrace{c^2\sigma_i\left[\frac{-i\hbar\partial_i V(r)}{(2mc^2+\varepsilon-V(r))^2}\right]\sigma_j p_j\varphi}_{} + \frac{c^2}{[2mc^2+\varepsilon-V(r)]}\underbrace{\sigma_i\sigma_j p_i p_j}\varphi$$

$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$

$\underbrace{p_i p_i}_{\Downarrow\, p^2} + i\vec{\sigma}\cdot\cancel{(\vec{p}\times\vec{p})}$ → da hier es kein $\vec{A}$ gibt

Erwartungswerte für gebundene Zustände:

$$\frac{-\hbar^2c^2\;\sigma_i\sigma_j}{[2mc^2+\varepsilon-V(r)]^2}\underbrace{\int d\vec{r}\,\varphi^*(\vec{r})\,\partial_i V(r)\,\partial_j\varphi(\vec{r})}_{} \underset{\boxed{i=j}}{=} \frac{-\hbar^2c^2}{[2mc^2+\varepsilon-V(r)]}\int d\vec{r}\,\varphi^*\partial_i V\,\partial_i\varphi$$

Da die gebundenen Zustände entweder GERADE oder UNGERADE Zustände sein werden (für ein Zentralpotential $V(r)$), wird das Integral immer verschwinden wenn $i \neq j$

IV

VIII

$$= -\frac{\hbar^2 c^2}{[2mc^2 + \varepsilon - \cancel{V(r)}]^2} \int d\vec{r}\; \underbrace{\varphi^*(\vec{r})\,[\partial_i V(r)]\,\partial_i \varphi}$$

↳ vernachlässigbar zu dieser Ordnung

• Vorfaktor

$$-\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}$$

(*) Für das ungestörte Wasserstoffproblem kann φ reell gewählt werden!

$$\Downarrow$$

$$-\int \partial_i[\varphi^* \partial_i V]\varphi = -\left[\int \partial_i \varphi^* \partial_i V \varphi + \int \varphi^* (\partial_i \partial_i V)\varphi\right]$$

$$\Rightarrow \int \varphi^* \partial_i V \partial_i \varphi + \int \partial_i \varphi^* \partial_i V \varphi = -\int \varphi^* [\partial_i \partial_i V]\varphi$$

$$\Rightarrow \int \varphi^* \partial_i V \partial_i \varphi = -\frac{1}{2}\int \varphi^* [\partial_i \partial_i V(r)]\varphi$$

$$= +\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\,\partial_i\partial_i V(r) = \underbrace{\boxed{\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta V(r)}}_{\hat{H}_{Darwin}}$$

Da: $\Delta\left(\frac{1}{r}\right) = -4\pi\,\delta(\vec{r})$

• Falls $\hat{V}(r) = -\frac{Ze^2}{r} \Rightarrow \hat{H}_{Darwin} = -\frac{Z\hbar^2 e^2}{8m^2c^2}\Delta\left(\frac{1}{r}\right) = \frac{\pi Z \hbar^2 e^2}{2m^2c^2}\delta(\vec{r})$

⇒ Für $Z = 1$

$$E^0(n) = -\frac{Ry}{n^2} \qquad \Delta E_{Darwin} = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}4\pi e^2 \left|\varphi_{nlm}(\vec{r}=0)\right| \delta_{l0} \begin{cases} 1s \rightarrow \frac{\alpha^4 mc^2}{2} \\ 2s \rightarrow \frac{\alpha^4 mc^2}{16} \end{cases}$$