3. PLENUM: Zitterbewegung & Darwin Term

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = \underbrace{\left[c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m c^2\right]}_{\hat{H}_D}\psi \quad \text{mit} \left\{ \begin{array}{l} \beta^2 = 1 \\ \alpha_i\beta + \beta\alpha_i = \emptyset \\ \alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 2\delta_{ij} \end{array} \right| \to \text{Clifford Algebra}$$

$\psi \Downarrow$ Viererspinor ! $\qquad \psi \Downarrow$ Viererspinor !

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)

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

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

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

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

(I)

(II)

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

- $\frac{c^2 p_i}{E} \approx \frac{c^2 p_i}{mc^2} = \frac{p_i}{m}$

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

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

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:

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

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

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

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

$$= V(\vec{r}) + \frac{1}{6}\left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2 \nabla^2 V$$ ⇒ 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: $$\begin{pmatrix}\tilde\varphi\\ \tilde\chi\end{pmatrix} = e^{iEt}\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} \quad \text{mit} \begin{cases} E \simeq mc^2 + \varepsilon + \dots \\ \varepsilon \ll mc^2\end{cases} \quad \text{und} \quad \vec\pi = \vec p - \cancel{\frac{q}{c}\vec A} \to \vec p$$

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

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

2'te Zeile:

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

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

V

• Explizit: $\hat\pi = -i\hbar\partial_i$

$$\varepsilon\varphi = \underbrace{c^2\sigma_i \hat p_i\left[\frac{1}{2mc^2+\varepsilon-V(r)}\right]\sigma_j p_j\varphi}+ V(r)\varphi$$

Kinetische-Energie Beitrag + relat. Korrekturen ⇓

$$\frac{c^2p^2}{[2mc^2+\varepsilon-V(r)]}\varphi \simeq \left[\frac{p^2}{2m}+\dots\right]\varphi$$

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

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

$$\underbrace{p_i p_i}_{\Downarrow\, p^2} + i\vec\sigma\cdot(\cancel{\vec p\times\vec p})$$

da hier es kein $\vec A$ gibt

⇓

Erwartungswerte für gebundene Zustände:

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

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

VI

VIII

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

$\hookrightarrow$ vernachlässigbar zu dieser Ordnung

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

$$\Downarrow$$

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

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

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

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

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

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

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

$\rightarrow$ Für $Z = 1$

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