

DAS KLEIN-PARADOX

Wir haben in der Vorlesung gesehen, dass der Ortsoperator \mathbf{r} auf Wellenpakete eine überraschende Wirkung ausübt. Selbst wenn das Wellenpaket anfänglich nur aus Lösungen positiver Energie zusammengesetzt ist,

$$\Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} a_{\mathbf{p}}^{(+)}(t) \Psi_{\mathbf{p}}^{(+)} e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar}, \quad \Psi_{\mathbf{p}}^{(+)} = \frac{1}{2\sqrt{E_{\mathbf{p}} mc^2}} \begin{pmatrix} mc^2 + E_{\mathbf{p}} \\ mc^2 - E_{\mathbf{p}} \end{pmatrix},$$

entsteht durch die Wirkung des Ortsoperators ein Anteil aus Lösungen negativer Energie! Abweichend zur Vorlesung sind die Eigenlösungen der freien Klein-Gordon-Gleichung, die $\Psi_{\mathbf{p}}^{(+)}$, hier orthonormiert, da dies im folgenden ein paar Vorfaktoren vereinfacht. Das Skalarprodukt war definiert als $\langle \Psi | \Psi' \rangle \equiv \Psi^+ \tau_3 \Psi'$ mit $\tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. Die Zeitabhängigkeit haben wir vollständig in den Amplituden $a_{\mathbf{p}}^{(\pm)}$ untergebracht. Wenden wir \mathbf{r} auf obiges Wellenpaket an, so finden wir

$$\begin{aligned} \mathbf{r}\Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} a_{\mathbf{p}}^{(+)}(t) \Psi_{\mathbf{p}}^{(+)} \mathbf{r} e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar} \\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} a_{\mathbf{p}}^{(+)}(t) \Psi_{\mathbf{p}}^{(+)} \left(-i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar} \right) \\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left(i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{(+)}(t) \right) \Psi_{\mathbf{p}}^{(+)} e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar} + \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} a_{\mathbf{p}}^{(+)}(t) \left(i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}}^{(+)} \right) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar}. \end{aligned}$$

Im ersten Schritt haben wir einfach \mathbf{r} durch eine geeignete Ableitung der Exponentialfunktion nach \mathbf{p} ersetzt, im zweiten Schritt wurde partiell integriert (unter den üblichen Annahmen, so dass Randterme nicht beitragen). Nun ist aber $\nabla_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} = -\frac{\mathbf{p}c^2}{2E_{\mathbf{p}}^2} \Psi_{\mathbf{p}}^{(\mp)}$. Der zweite Summand der letzten Gleichung wird also durch den Ortsoperator in einen Beitrag von Lösungen negativer Energie verwandelt, während der erste Summand nur die Amplitude der Lösungen positiver Energie verändert. Der Ortsoperator kann demnach in einen geraden und einen ungeraden Anteil zerlegt werden, so dass gilt:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}\Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{r}_+ \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{r}_- \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t), \\ \mathbf{r}_+ \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) &= + \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left(i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{(+)}(t) \right) \Psi_{\mathbf{p}}^{(+)} e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar} \\ \mathbf{r}_- \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) &= - \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} a_{\mathbf{p}}^{(+)}(t) \frac{i\hbar \mathbf{p}c^2}{2E_{\mathbf{p}}^2} \Psi_{\mathbf{p}}^{(-)} e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar}. \end{aligned}$$

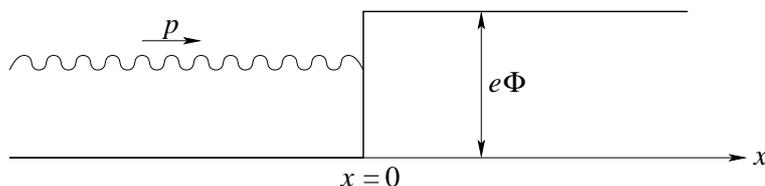
Anwenden des Ortsoperators auf ein Wellenpaket aus Zuständen positiver Energie führt also zu einem gemischten Wellenpaket, das auch Zustände negativer Energie mit der Amplitude

$$a_{-\mathbf{p}}^{(-)*}(t) = a_{\mathbf{p}}^{(+)} \frac{i\hbar \mathbf{p}c^2}{2E_{\mathbf{p}}^2}$$

enthält. Man kann zeigen, dass ein Wellenpaket aus Zuständen nur positiver Energie niemals stärker lokalisiert sein kann, als die Compton-Wellenlänge \hbar/mc . In der Tat muss die Amplitude eines Eigenzustandes zum geraden Anteil des Ortsoperators, $\mathbf{r}_+ \Psi^{(+)}(\mathbf{r}) = \mathbf{r}_0 \Psi^{(+)}(\mathbf{r})$, die Bedingung $i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{(+)} = \mathbf{r}_0 a_{\mathbf{p}}^{(+)}$ erfüllen. Also ist die Amplitude, bis auf Normierung, gegeben durch $a_{\mathbf{p}}^{(+)} = \exp(-i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_0)/\hbar)$. Damit sind Eigenzustände zu \mathbf{r}_+ gegeben als

$$\Psi_{\mathbf{r}_0}^{(+)}(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \Psi_{\mathbf{p}}^{(+)} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)/\hbar}.$$

Dieser Zustand ist nicht normierbar und ist im Ortraum über einen Bereich mit Radius $\sim \hbar/mc$ um \mathbf{r}_0 herum verschmiert.



Das Problem. Wir wollen diesen Sachverhalt explizit machen. Dazu betrachten wir ein positiv geladenes Teilchen mit Impuls \mathbf{p} , das von links eine elektrostatische Barriere der Höhe $V = e\Phi$ trifft. Die Potentialschwelle sei an der Stelle $x = 0$, d.h.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{wenn } x < 0, \\ e\Phi & \text{wenn } x > 0. \end{cases}$$

Dieses Problem kann ganz analog zum nicht-relativistischen Fall gelöst werden, indem man die stationären Lösungen für dieses Potential bestimmt. Da das Teilchen mit Impuls \mathbf{p} aus einem Bereich ohne Potential einläuft, ist die Energie E_p . Für $x < 0$ ist die Wellenfunktion demnach

$$\Psi(x) = a_p^{(+)} e^{ipx/\hbar} + a_p^{(-)} e^{-ipx/\hbar},$$

was eine einfallende Welle und eine reflektierte Welle darstellt. Für $x > 0$ lautet die Klein-Gordon-Gleichung

$$(E_p - V)^2 \Psi(x) = -\hbar^2 c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) + m^2 c^4 \Psi(x). \quad (*)$$

Die Lösung dieser Gleichung ist offensichtlich von der Form

$$\Psi(x) = \tilde{a}_k e^{ikx} e^{-iE_p t/\hbar} \quad \text{mit} \quad \hbar^2 c^2 k^2 + m^2 c^4 = (E_p - V)^2. \quad (**)$$

Die Randbedingungen für die Wellenfunktion an der Stelle $x = 0$ sind wie üblich, nämlich dass $\Psi(x)$ und $\partial_x \Psi(x)$ an der Stelle $x = 0$ stetig sein müssen. Man beachte allerdings, dass $\partial_t \Psi(x)$ an der Stelle $x = 0$ nicht stetig ist, da das Potential dort eine Unstetigkeitsstelle aufweist. Die Amplituden $a_p^{(+)}$, $a_p^{(-)}$ und \tilde{a}_k stehen demnach wie folgt miteinander in Beziehung:

$$a_p^{(-)} = \frac{p - \hbar k}{p + \hbar k} a_p^{(+)}, \quad \tilde{a}_k = \frac{2p}{p + \hbar k} a_p^{(+)}. \quad (**)$$

Wie im nicht-relativistischen Fall müssen wir jetzt eine Fallunterscheidung machen, allerdings treten jetzt *drei* Möglichkeiten auf:

$E_p > V + mc^2$. In diesem Fall kann das Teilchen die Barriere überwinden. Die Situation ist genau wie im nicht-relativistischen Fall, ein Teil der Welle wird reflektiert, ein anderer Teil wird transmittiert, kommt also durch. Wir finden

$$k = \frac{\sqrt{(E_p - V)^2 - m^2 c^4}}{\hbar c}.$$

$E_p - mc^2 < V < E_p + mc^2$. In diesem Fall muss k imaginär sein, $k = i\kappa$, so dass die Wellenfunktion für $x \rightarrow \infty$ gegen null strebt. Wir finden

$$\kappa = \frac{\sqrt{m^2 c^4 - (E_p - V)^2}}{\hbar c}.$$

In diesem Fall wird die Welle an der Barriere vollständig reflektiert. Betrachten wir jedoch einmal die Ladungsdichte auf der rechten Seite $x > 0$. Die Ladungsdichte ist gegeben als

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{2mc^2} [\Psi^* (i\hbar \partial_t - e\Phi) \Psi + \Psi (-i\hbar \partial_t - e\Phi) \Psi^*] \quad \text{also} \\ \rho(x) &= \frac{E_p - V}{mc^2} |\tilde{a}_k|^2 e^{-2\kappa x}. \end{aligned}$$

Wenn $E_p > V$ ist, so haben wir eine positive, exponentiell abfallende, Ladungsdichte, auf der rechten Seite der Barriere, was dem bekannten Tunneleffekt entspricht, bei dem die Amplitude exponentiell abfallend in die Barriere eindringt. Für $V > E_p$ allerdings erhalten wir eine *negative* Ladungsdichte! Wir reflektieren positiv geladene Teilchen von der Wand und finden eine negative Ladung im inneren der Wand.

$V > E_p + mc^2$. Nun ist das Potential so stark, dass wir eigentlich nicht erwarten, dass das Teilchen die Barriere überwinden kann. Die Klein-Gordon-Gleichung (*) liefert aber, dass k wieder eine reelle Lösung hat! Also existiert ein Teilchenstrom auf der rechten Seite der Barriere. Die Gruppengeschwindigkeit der Wellen für $x > 0$ ist $v_{\text{gr}} = \frac{\partial}{\partial(\hbar k)} E_p$. Mit (**) ergibt sich

$$\hbar^2 c^2 k = (E_p - V) \frac{\partial E_p}{\partial k} \quad \implies \quad v_{\text{gr}} = \frac{\hbar c^2 k}{E_p - V}.$$

Der Nenner dieser Gruppengeschwindigkeit ist negativ. Damit also ein(e) Welle(npaket) von der Barriere nach recht in Richtung positiver x wandern kann, muss $k < 0$ sein. Dies impliziert aber, dass der Reflektionskoeffizient

$a_p^{(-)}/a_p^{(+)} > 1$ sein muss! Es wird also mehr reflektiert, als einläuft. Die Ladungsdichte auf der rechten Seite ergibt sich zu

$$\rho(x) = \frac{E_p - V}{mc^2} |\tilde{a}_k|^2 < 0,$$

ist also ebenfalls negativ. Man rechnet leicht nach, dass auch der Ladungsstrom auf der rechten Seite negativ ist.

Eine konsistente Interpretation dieses Sachverhaltes ist die Annahme, dass die einfallende Welle an der Barriere Paare von Teilchen und Antiteilchen produziert. Da die Antiteilchen mit entgegengesetzter Ladung das Potential für $x > 0$ als anziehend empfinden, wandern sie nach rechts, was den negativen Ladungsstrom erklärt. Die erzeugten Teilchen empfinden das Potential nach wie vor als abstoßend, und wandern zusammen mit der vollständig reflektierten Welle nach links. Somit kann der auslaufende Strom nach links größer sein, als der von links einlaufende. Der gesamte auslaufende Strom ist natürlich exakt gleich dem einlaufenden Strom, da die Ladung eine Erhaltungsgröße ist. Diese Interpretation des Problems durch die Erzeugung von Teilchen/Antiteilchen-Paaren verletzt übrigens nicht die Energieerhaltung. Die Energie eines auf der linken Seite erzeugten Teilchens ist E_p , während die eines auf der rechten Seite erzeugten Antiteilchens gerade $\sqrt{\hbar^2 c^2 k^2 + m^2 c^4} - V$ ist, da das elektrostatische Potential für ein Teilchen der entgegengesetzten Ladung das entgegengesetzte Vorzeichen hat. Nehmen wir in (**) die positive Wurzel auf beiden Seiten, so finden wir $E_p + \sqrt{\hbar^2 c^2 k^2 + m^2 c^4} - V = 0$, wie es sein muss. Es kostet also keine Energie, ein Teilchen/Antiteilchen-Paar zu erzeugen. Dies ist möglich, weil das Potential so groß ist, dass die Energie für ein Antiteilchen auf der rechten Seite nicht nur kleiner als mc^2 wird, sondern tatsächlich negativ ist.

Die Konsequenz ist, dass die Ein-Teilchen-Beschreibung relativistischer Quantenmechanik zusammenbricht, sobald das Potential auf der rechten Seite stärker als $2mc^2$ wird, also stärker als die Ruheenergie eines Teilchen/Antiteilchen-Paares. Im Prinzip ist die Ein-Teilchen-Version der relativistischen Quantenmechanik gar nicht in der Lage, akkurat so starken Potentialen bzw. Felder zu behandeln. Eine exaktere Behandlung müsste ja auch die attraktive Coulomb-Wechselwirkung der Teilchen/Antiteilchen-Paare untereinander berücksichtigen. Es drängen sich sofort Fragen auf wie zum Beispiel, ob es auch ohne einlaufendes Teilchen an der Barriere zu Paarerzeugung kommt, oder ob eine unendlich ausgedehnte Barriere physikalisch realisierbar ist. Solche Fragen können korrekt nur in einer Viel-Teilchen-Version der relativistischen Quantenmechanik beantwortet werden, also in der *Quantenfeldtheorie*.

NICHT-RELATIVISTISCHER LIMES DER DIRAC-GLEICHUNG

In der Vorlesung hatten wir als ersten nicht-relativistischen Limes der Dirac-Gleichung die Pauli-Gleichung

$$i\hbar\partial_t\varphi = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 \varphi - \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \varphi + (e\Phi + mc^2)\varphi$$

erhalten, wobei $\mathbf{B} = \text{rot}\mathbf{A}$ das äußere Magnetfeld bezeichnet, und φ die große Zwei-Spinor-Komponente des vollen Vier-Spinors $\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ ist. Bei dieser Näherung wurden die kleinen Komponenten χ des Vier-Spinors vernachlässigt, da diese für kleine Geschwindigkeiten um die Ordnung $\mathcal{O}(v/c)$ kleiner sind, als die großen Komponenten φ . Bezeichnen wir wieder mit $\boldsymbol{\tau}$ die 4×4 Matrizen $\boldsymbol{\tau} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}$, so war der Ausgangspunkt durch das Paar gekoppelter Gleichungen

$$i\hbar\partial_t\varphi = c \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\tau} \chi + (e\Phi + mc^2)\varphi, \quad (\clubsuit)$$

$$i\hbar\partial_t\chi = c \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\tau} \varphi + (e\Phi - mc^2)\chi \quad (\spadesuit)$$

gegeben, das vollständig äquivalent zur Dirac-Gleichung des Vier-Spinors $\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ ist.

Nächste Ordnung in v/c . Die zweite Gleichung (\spadesuit) liefert uns eine implizite Definition für χ , nämlich

$$\chi = \frac{1}{2mc} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\tau} \varphi - \frac{1}{2mc^2} (i\hbar\partial_t - mc^2 - e\Phi) \chi.$$

Vernachlässigen wir hier χ auf der rechten Seite, erhalten wir gerade die Bedingung, die uns zur Pauli-Gleichung führte. Die nächste Näherung erhalten wir durch einmaliges Iterieren dieser Gleichung,

$$\chi = \frac{1}{2mc} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\tau} \varphi - \frac{(i\hbar\partial_t - mc^2 - e\Phi)}{4m^2c^3} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\tau} \varphi.$$

Diesen länglichen Ausdruck für χ setzt man nun in die erste Gleichung (\clubsuit) ein und erhalten damit die erste relativistische Korrektur der Pauli-Gleichung für φ ,

$$-\frac{1}{4m^2c^2} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} (i\hbar\partial_t - mc^2 - e\Phi) \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \varphi.$$

Dieser Term ist um die Ordnung $\mathcal{O}(v^2/c^2)$ kleiner, als der Beitrag der kinetischen Energie $\mathbf{p}^2/2m$. Der Korrekturterm kann etwas umgeschrieben werden, wenn man das elektrische Feld $\mathbf{E} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c}\partial_t\mathbf{A}$ einsetzt,

$$-\frac{1}{4m^2c^2} \left[\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]^2 (i\hbar\partial_t - mc^2 - e\Phi) \varphi - \frac{ie\hbar}{4m^2c^2} \left[\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right] (\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \varphi.$$

In niedrigster Ordnung in v/c ist $(i\hbar\partial_t - mc^2 - e\Phi)\varphi = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\varphi$. Verwenden wir wieder die Identität $(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})$, so wird der Korrekturterm schließlich zu

$$-\left[\frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) + \frac{ie\hbar}{4m^2c^2} \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} \right] \varphi.$$

Interpretation der Korrekturterme. Der erste Term der letzten Gleichung ist einfach die erste relativistische Korrektur der kinetischen Energie. Der zweite Term ist nicht anderes als die Spin-Bahn-Kopplung. Der letzte Term bringt allerdings eine unschöne Schwierigkeit mit sich, er ist nämlich nicht hermitesch. Ein nicht-hermitescher Term in einer Wellengleichung bedeutet nämlich, dass das Normierungsintegral $\int d^3r \varphi^\dagger \varphi$ sich mit der Zeit ändern kann. Der Grund dafür ist schnell eingesehen: Die voll Dirac-Gleichung erfüllt die Normierungsbedingung

$$\int d^3r \psi^\dagger \psi = \int d^3r [\varphi^\dagger \varphi + \chi^\dagger \chi] = 1.$$

In niedrigster Ordnung ist aber $\chi = \frac{-i\hbar}{2mc} (\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}) \varphi$, so dass $\chi^\dagger \chi = \varphi^\dagger \frac{\mathbf{p}^2}{4m^2c^2} \varphi$ ist. Damit kann das Integral von $\varphi^\dagger \varphi$ nur bis auf Terme der Ordnung $\mathcal{O}(v^2/c^2)$ konstant bleiben. Eigentlich betrachtet man das Integral $\int d^3r \varphi^\dagger (1 + \mathbf{p}^2/4m^2c^2) \varphi$, das in Ordnung $\mathcal{O}(v^2/c^2)$ die Form

$$\int d^3r \left[\left(1 + \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2} \right) \varphi \right]^\dagger \left[\left(1 + \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2} \right) \varphi \right]$$

hat und zeitlich konstant gleich eins bleibt, einschließlich von $(v/c)^2$ Termen.

Dies legt nahe, dass der korrekte nicht-relativistische Limes der Dirac-Wellenfunktion, also der Limes, dessen Normierung zeitlich konstant bleibt, der Zwei-Spinor

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \left(1 + \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2} \right) \varphi(\mathbf{r}, t)$$

ist. Offensichtlich gilt für diese Wellenfunktion nach Konstruktion $\int d^3r \Psi^\dagger \Psi = 1$, so dass wir erwarten, dass die Wellengleichung für Ψ keine nicht-hermiteschen Terme aufweist. Um diese Wellengleichung für Ψ zu konstruieren, nehmen wir die Gleichung für φ bis zur Ordnung $(v/c)^2$,

$$\left[i\hbar\partial_t - mc^2 - \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c)^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} \right] \varphi = - \left[\frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} + \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) \right] \varphi + \left[e\Phi - \frac{ie\hbar}{4m^2c^2} \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} \right] \varphi,$$

multiplizieren sie von links mit $(1 + \mathbf{p}^2/8m^2c^2)$ und versuchen, diesen Term $(1 + \mathbf{p}^2/8m^2c^2)$ nach rechts zu durchzukommutieren, um mit ihm aus φ den Spinor Ψ zu formen. Betrachtet man nur Terme bis zur Ordnung $\mathcal{O}(c^{-2})$, so kommutiert dieser Term in der Tat mit allen Termen der Dirac-Gleichung, bis auf $e\Phi$. Nun ist

$$\frac{1}{8m^2c^2} [\mathbf{p}^2, e\Phi] - \frac{ie\hbar}{4m^2c^2} \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} (\nabla^2 e\Phi)$$

in niedrigster Ordnung in v/c . Damit finden wir schließlich, dass Ψ die Gleichung

$$i\hbar\partial_t \Psi = \left[mc^2 + \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 - \frac{\mathbf{p}^2}{8m^3c^2} \right] \Psi - \left[\frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} + \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) \right] \Psi + \left[e\Phi + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} (\nabla^2 e\Phi) \right] \Psi$$

erfüllt. Dies ist in der Tat der korrekte nicht-relativistische Limes der Dirac-Gleichung, alle Terme sind nun hermitesch. Die erste [] Klammer gibt die Korrektur der kinetischen Energie bis zur Ordnung $(v/c)^2$ an, die zweite [] Klammer enthält das Pauli-sche magnetische Moment und die Spin-Bahn-Kopplung. Die dritte [] Klammer

enthält eine Korrektur zum Potentialterm, der als *Darwin-Term* bekannt ist. Aus der Poisson-Gleichung folgt $\nabla^2 e\Phi(\mathbf{r}) = -4\pi eQ(\mathbf{r})$, wobei $Q(\mathbf{r})$ die Ladungsdichte ist, die das elektrostatische Potential $\Phi(\mathbf{r})$ erzeugt. Der Darwin-Term ist also im wesentlichen eine Kontakt-Wechselwirkung zwischen dem Teilchen und der Ladung $Q(\mathbf{r})$. Für das Coulomb-Potential $e\Phi(\mathbf{r}) = -Ze^2/r$ ergibt sich der Darwin-Term zu $\frac{\pi\hbar^2}{2m^2c^2}Ze^2\delta(\mathbf{r})$. Dieser Term führt zu einer Erhöhung der Energieniveaus der s -Zustände, da diese eine am Ursprung nicht verschwindende Wahrscheinlichkeitsdichte besitzen.

Darwin-Term. Der Darwin-Term kann recht einfach mit Hilfe der sogenannten *Zitterbewegung* des Elektrons erklärt werden. Wir haben bereits beim Klein-Paradox gesehen, dass ein Wellenpaket, das ausschließlich aus Zuständen positiver Energie zusammengesetzt ist, nicht stärker lokalisiert sein kann als die Compton-Wellenlänge \hbar/mc . Dies gilt für die Lösungen der Dirac-Gleichung ganz genauso. Wenn nun ein relativistisches Teilchen im Grunde immer über einen Bereich mit Radius \hbar/mc verschmiert ist, so wechselwirkt es zu jedem Zeitpunkt auch mit dem Potential gemittelt über den Bereich der Größe \hbar/mc um seine Position. Um dies zu berücksichtigen, sollte man also den Potentialterm $e\Phi(\mathbf{r})$ in der Schrödinger-Gleichung durch seinen Mittelwert $\overline{e\Phi(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r})}$ ersetzen, wobei über Werte $\delta\mathbf{r}$ mit $|\mathbf{r} - \delta\mathbf{r}| \sim \hbar/mc$ gemittelt wird. Entwickeln wir das, so erhalten wir

$$e\Phi(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}) \approx e\Phi(\mathbf{r}) + \delta\mathbf{r} \cdot \nabla e\Phi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}(\delta\mathbf{r} \cdot \nabla)^2 e\Phi(\mathbf{r}).$$

Mitteln wir dies über $\delta\mathbf{r}$ unter der Annahme sphärischer Symmetrie, so finden wir

$$\overline{e\Phi(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r})} \approx e\Phi(\mathbf{r}) \frac{1}{6} \overline{(\delta\mathbf{r})^2} \nabla^2 e\Phi(\mathbf{r}).$$

Setzt man nun schließlich $\overline{(\delta\mathbf{r})^2} \approx (\hbar/mc)^2$ ein, so ergibt sich der Korrekturterm zu $e\Phi(\mathbf{r})$ exakt in der Form, Größe und Vorzeichen, wie der Darwin-Term. Allerdings ist dies ein sehr heuristisches Argument, da der Darwin-Term nämlich für spinlose (skalare) Teilchen *nicht* in dieser Ordnung der relativistischen Korrektur auftritt, obwohl auch spinlose Teilchen, wie wir gesehen haben, ähnlich über den Bereich der Compton-Wellenlänge verschmiert sind. Die Form des Darwin-Terms hängt entscheidend vom Spin des Teilchens ab, und eine korrekte und zufriedenstellende physikalische Beschreibung muss dem Rechnung tragen. Dies übersteigt allerdings den Rahmen unserer Vorlesung. :- (

Spin-Bahn-Kopplung. Um zu sehen, wo die Spin-Bahn-Kopplung herkommt, ist es nützlich, die vom Spin abhängigen Terme noch einmal umzuschreiben,

$$-\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma} \cdot \left[\mathbf{B} + \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{p}}{2mc} \right] = -\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma} \cdot \left[\mathbf{B} + \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{p}}{mc} \right] + \frac{e\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p}). \quad (\heartsuit)$$

Der erste Term, $\mathbf{B} + (\mathbf{E} \times \mathbf{p})/mc$, ist bis zur Ordnung v/c das magnetische Feld, das das Teilchen in seinem Ruhesystem sieht. Also ist der erste Term der rechten Seite gerade die Wechselwirkung des magnetischen Moments des Teilchens mit eben diesem Feld. Der zweite Term der rechten Seite kann mit Hilfe eines semi-klassischen Argumentes verstanden werden: Der Spin eines Teilchens, das sich auf einer gekrümmten Bahn bewegt, fängt an zu präzessieren. Dies ist die sogenannte *Thomas-Präzession*. Die Frequenz $\delta\Omega$ dieser Präzession des Spins des Teilchens, das sich mit Geschwindigkeit \mathbf{v} , $|\mathbf{v}| \ll c$, und Beschleunigung $\dot{\mathbf{v}}$ bewegt, ist nach Thomas gegeben als

$$\delta\Omega = \dot{\mathbf{v}} \times \frac{\mathbf{v}}{2c^2}, \quad (\diamond)$$

wie wir gleich noch sehen werden. Diese Präzession führt zu einer Erhöhung der klassischen kinetischen Energie um den Betrag $\delta E = \mathbf{S} \cdot \delta\Omega$, wobei \mathbf{S} der Spin-Drehimpuls ist. [Dies ist ganz analog zu der Änderung der kinetischen Translationsenergie eines Teilchens mit Impuls \mathbf{p} durch Erhöhen von dessen Geschwindigkeit um $\delta\mathbf{v}$, nämlich $\delta(mv^2/2) = m\mathbf{v} \cdot \delta\mathbf{v} = \mathbf{p} \cdot \delta\mathbf{v}$.] In niedrigster Ordnung in v/c ist die Beschleunigung $\dot{\mathbf{v}}$ durch Newton's Gleichung $m\dot{\mathbf{v}} = e\mathbf{E}$ gegeben. Also haben wir

$$\delta E = \frac{\mathbf{S} \cdot (e\mathbf{E} \times \mathbf{v})}{2mc} = \frac{e\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{v}),$$

also genau der zweite Term in (\heartsuit) .

Wir wollen nun noch (\diamond) ableiten. Es sei $|\mathbf{0}\rangle$ der interne Zustand eines Teilchens mit Geschwindigkeit \mathbf{v} , gesehen in seinem Ruhesystem. Diesen müssen wir ins Laborsystem umrechnen, das sich bezüglich des Teilchens mit der Geschwindigkeit $-\mathbf{v}$ bewegt. Der Zustand des Teilchens, gesehen im Laborsystem, ist also

$$|\mathbf{v}\rangle = \Lambda^{-1}(-\mathbf{v})|\mathbf{0}\rangle = \Lambda(\mathbf{v})|\mathbf{0}\rangle.$$

Nehmen wir nun an, das Teilchen beschleunige auf die Geschwindigkeit $\mathbf{v} + \delta\mathbf{v}$, wobei aber der interne Zustand $|\mathbf{0}\rangle$ in seinem Ruhesystem unverändert bleibe. Im Laborsystem ist der neue Zustand dann gegeben durch

$$|\mathbf{v} + \delta\mathbf{v}\rangle = \Lambda(\mathbf{v} + \delta\mathbf{v})|\mathbf{0}\rangle = \Lambda(\mathbf{v} + \delta\mathbf{v})\Lambda^{-1}(\mathbf{v})|\mathbf{v}\rangle.$$

Bei einer kreisförmigen Bewegung ist $\delta\mathbf{v} \perp \mathbf{v}$. Ist weiter $|\mathbf{v}| \ll c$, so ist in guter Näherung

$$\Lambda(\mathbf{v} + \delta\mathbf{v})\Lambda^{-1}(\mathbf{v}) \approx \exp(-i\delta\boldsymbol{\theta} \cdot \boldsymbol{\sigma}/2) \exp(\boldsymbol{\alpha} \cdot (\delta\mathbf{v})/2c), \quad \delta\boldsymbol{\theta} = \frac{1}{2c^2} \delta\mathbf{v} \times \mathbf{v}.$$

Dies ist das Produkt eines infinitesimalen Lorentz-Boosts um die Geschwindigkeit $\delta\mathbf{v}$ und einer infinitesimalen Rotation um den Winkel $|\delta\boldsymbol{\theta}|$ um die Achse, die senkrecht auf der Ebene steht, in der das Elektron kreist. Der neue Zustand $|\mathbf{v} + \delta\mathbf{v}\rangle$ ist also der alte Zustand $|\mathbf{v}\rangle$ ein wenig geboostet und ein wenig rotiert um $\delta\boldsymbol{\theta}$. Wird das Teilchen konstant beschleunigt (wie es bei einer Kreisbewegung der Fall ist), so erscheint der interne Zustand des Teilchens im Laborsystem zu präzessieren, und zwar mit der Winkelgeschwindigkeit

$$\delta\boldsymbol{\Omega} = \frac{\delta\boldsymbol{\theta}}{\delta t} = \frac{\delta\mathbf{v}}{\delta t} \times \frac{\mathbf{v}}{2c^2} = \frac{1}{2c^2} \dot{\mathbf{v}} \times \mathbf{v}.$$

Dies ist genau die Thomas-Präzession (\diamond).

Der Thomas-Beitrag zum Spin-Bahn-Term existiert übrigens unabhängig davon, ob die Kräfte, die auf das Teilchen wirken, elektromagnetischer Natur sind. Selbst ein elektrisch neutrales Spin 1/2 Teilchen in einem Potential v erfährt eine Spin-Bahn-Wechselwirkung

$$\frac{\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{F} \times \mathbf{p}), \quad \mathbf{F} = -\nabla V.$$

In diesem Sinne ist die Existenz einer Auspaltung von Energieniveaux aufgrund von Spin-Bahn-Wechselwirkungen ein guter Test um zu sehen, ob der innere Freiheitsgrad des Teilchens in der Tat ein Drehimpuls ist (und somit den Gesetzen der relativistischen Kinematik unterliegt), oder ein nicht-kinematischer Freiheitsgrad wie zum Beispiel der Isospin.

Weitere Korrekturen. Es gibt zwei weitere Korrekturen, die man zum Beispiel im Spektrum des Wasserstoffatoms direkt messen kann. So erscheint jedes Energieniveau bei genauer Messung im Magnetfeld nochmals aufgespalten. Dies rührt von der Wechselwirkung des Spins des Elektrons mit dem Kernspin des Protons her. Diese Aufspaltung wird als *Hyperfinestruktur* bezeichnet. Der Zusatzterm im Hamilton-Operator ist

$$H' = \frac{|e|\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_{\text{pr}}(\mathbf{r}) = -g_{\text{pr}} \mu_B \mu_{\text{pr}} [\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\text{pr}} \nabla^2 - (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla)(\boldsymbol{\sigma}_{\text{pr}} \cdot \nabla)] \frac{1}{2r}.$$

wobei \mathbf{B}_{pr} das magnetische Feld ist, das vom magnetischen Moment des Protons erzeugt wird, g_{pr} das gyromagnetische Verhältnis des Protons bezeichnet, und μ_B bzw. μ_{pr} das Bohrsche Magneton bzw. das Magneton des Protons darstellt.

Eine weitere Korrektur rührt von der Wechselwirkung des Elektrons mit dem elektromagnetischen Strahlungsfeld her. Dieses Strahlungsfeld ist ebenfalls quantisiert und weist Quantenfluktuationen auf. Die Fluktuationen um das Nullpunkts-Feld führen zu einer Verschiebung der Energieniveaux, und zwar so, dass die Entartung von $2s_{1/2}$ und $2p_{1/2}$ wieder aufgehoben wird, da die Energieverschiebung umso stärker ist, je höher die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons nahe der Quelle des Felds ist. [Diese Entartung existiert sowohl bei nicht-relativistischer Behandlung des Wasserstoffatoms, als auch bei der Lösung der vollständigen Dirac-Gleichung für das Wasserstoffatom.] Man bezeichnet diesen Effekt als *Lamb-Shift*, und er wird durch einen Term

$$H'' = -\frac{e}{c} \int d^3r \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$$

beschrieben. Der Strom \mathbf{j} ist der Teilchenstrom des Elektrons. Man kann die Lamb-Shift mit den Methoden der Störungstheorie bestimmen, wenn man bis zur zweiten Ordnung geht. Man hat also

$$\Delta E_n = \sum_{n'} \sum_{\mathbf{k}, \boldsymbol{\lambda}} \frac{|\langle n', \mathbf{k}, \boldsymbol{\lambda} | H'' | n, 0 \rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'} - ck}, \quad \langle n', \mathbf{k}, \boldsymbol{\lambda} | H'' | n, 0 \rangle = -\frac{e}{c} \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2 c^2}{\omega_k V}} \langle n' | \mathbf{j}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\lambda}^* | n \rangle,$$

zu bestimmen, wobei die Elektron-Zustände durch n bezeichnet werden, und Photonen-Zustände durch den Impuls \mathbf{k} und die Polarisierung $\boldsymbol{\lambda}$ charakterisiert sind. So ist $|n, 0\rangle$ ein reiner Elektron-Zustand ohne Photonen, und $|n', \mathbf{k}, \boldsymbol{\lambda}\rangle$ ein intermediärer Zustand eines Elektrons mit einem Photon. Die Energie des intermediären Zustandes ist dann $\varepsilon_{n'} + ck$. Schließlich bezeichnet $\mathbf{j}_{\mathbf{k}}$ die Fourier-Komponente mit Impuls \mathbf{k} des Stromes $\mathbf{j}(\mathbf{r})$, in Dipol-Näherung gegeben durch $\mathbf{j}_{\mathbf{0}} = \mathbf{p}/m$. Allerdings ist die weitere Rechnung selbst in dieser groben Näherung immer noch nicht einfach. :- (