Karlsruher Institut für Technologie | Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Moderne Theoretische Physik II (WS 2024/25)

Prof. Dr. A. Shnirman
Adrian Reich

Lösungen zu Blatt 7
Besprechung 17.12.2024

---

1. Nicht-relativistischer Limes der Dirac-Gleichung (12 Punkte)

In der Vorlesung haben wir den Dirac-Spinor Ψ in seine oberen und unteren beiden Komponenten aufgeteilt $\Psi = \left(\begin{smallmatrix}\varphi \\ \chi\end{smallmatrix}\right)$, und den Pauli-Hamiltonian als effektiven Hamiltonoperator für φ im nicht-relativistischen Grenzfall hergeleitet.

a) Gehen Sie analog vor, um den effektiven Hamiltonoperator für χ im nicht-relativistischen Grenzfall für negative Energien zu finden. Überlegen Sie, wie dieser in die Form eines Hamiltonoperators für das Positron gebracht werden kann und interpretieren Sie Ihre Ergebnisse. (5 Punkte)

Im Pauli-Hamiltonian haben wir für den gyromagnetischen Faktor einen Wert von $g = 2$ erhalten, in sehr guter Übereinstimmung mit experimentell gemessenen Werten für das Elektron. Um dagegen das Proton beschreiben zu können, muss zur Dirac-Gleichung in Anwesenheit eines elektromagnetischen Feldes, zusätzlich zur minimalen Kopplung, ein weiterer Term addiert werden, sodass sie dann lautet

$$\left[\gamma^\mu \left(i\hbar\partial_\mu - \frac{q}{c}A_\mu\right) - \frac{\kappa_p \hbar q}{4mc^2}\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu} - mc\right]\Psi = 0, \tag{1}$$

wobei $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ der Feldstärketensor ist und $\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]$. Der zusätzliche Term berücksichtigt die innere Struktur des Protons, das bekanntlich kein Elementarteilchen ist.

b) Zeigen Sie die Forminvarianz der modifizierten Dirac-Gleichung unter Lorentz-Transformationen, wobei der Lorentz-transformierte Spinor nach wie vor $\Psi'(x') = S(\Omega)\Psi(\Omega^{-1}x')$ lautet. (3 Punkte)

c) Wie muss der Wert der (dimensionslosen) Konstanten κ_p gewählt werden, damit diese Gleichung im nicht-relativistischen Limes den experimentell bestimmten gyromagnetischen Faktor des Protons $g_p \approx 5.59$ reproduziert? (4 Punkte)

Lösungsvorschlag

a) In der Vorlesung hatten wir für φ und χ die beiden Gleichungen

$$\begin{cases} (E - mc^2 - q\Phi)\varphi = c(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})\chi, \\ (E + mc^2 - q\Phi)\chi = c(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})\varphi. \end{cases} \tag{2}$$

gefunden, wobei $\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}/c$. Wir betrachten nun negative Energien im nicht-relativistischen Limes, sodass $E - mc^2 - q\Phi \approx -2mc^2$. Daraus folgt $\varphi \approx -(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})\chi/2mc$, was wir in die zweite Gleichung einsetzen können. Wir wissen aus der Vorlesung, dass $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})^2 = \boldsymbol{\pi}^2 - q\hbar/c\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\sigma}$. Zudem definieren wir $\tilde{E} = E + mc^2$ und erhalten

$$\tilde{E}\chi = \left[-\frac{(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A})^2}{2m} + \frac{\hbar q}{2mc}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\sigma} + q\Phi\right]\chi. \tag{3}$$

Wir wollen nun den Ausdruck in eckigen Klammern als effektiven Hamiltonoperator identifizieren. Hierzu führen wir eine Reihe an Ersetzungen in den Variablen durch, die das Teilchen beschreiben, um ihn in eine uns bekannte Form zu bringen. Anschließend überlegen wir uns, wie diese Ersetzungen zu interpretieren sind. Zunächst bemerken wir, dass die kinetische Energie negativ ist. Wir ersetzen deshalb

$$\tilde{E} \to -\tilde{E} \tag{4}$$

und erhalten

$$\tilde{E}\chi = \left[\frac{(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A})^2}{2m} - \frac{\hbar q}{2mc}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\sigma} + (-q)\Phi\right]\chi. \tag{5}$$

Dies hat nun beinahe die Form, die wir vom Pauli-Hamiltonian für das Elektron kennen. Allerdings sind die Vorzeichen, mit denen die Ladung ans elektromagnetische Feld koppelt, inkonsistent. Die Ersetzung $q \to -q$ ist nicht zielführend. Die einzige Möglichkeit ist

$$\boldsymbol{p} \to -\boldsymbol{p}, \quad \boldsymbol{\sigma} \to -\boldsymbol{\sigma}, \tag{6}$$

zu ersetzen, womit folgt

$$H = \frac{(\boldsymbol{p} - \frac{(-q)}{c}\boldsymbol{A})^2}{2m} - \frac{\hbar(-q)}{2mc}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\sigma} + (-q)\Phi. \tag{7}$$

Dies entspricht gerade dem Pauli-Hamiltonian, wie wir ihn für das Elektron kennen, nur mit umgekehrtem Vorzeichen der Ladung. Beschreibt der Pauli-Hamiltonian für φ Elektronen, beschreibt dieser für χ also Positronen.
Aber wie sind die Ersetzungen zu interpretieren? Rein mathematisch, sind dies genau die Ersetzungen, die uns die Ladungskonjugation vorschreibt. Wir haben in der Aufgabe 1e des Übungsblatts 6 bereits gesehen, dass die Ladungskonjugation uns zu einem Zustand mit umgekehrtem Vorzeichen der Energie, des Impulses und der Spin-Projektion bringt. Dies kann man auch auf dem Operator-Level sehen. Nennen wir den unitären Teil des Ladungskonjugationsoperators $U_C = i\gamma^2$, so gilt

$$U_C(i\hbar\partial_t)^* U_C^{-1} = -i\hbar\partial_t, \tag{8}$$

$$U_C(-i\hbar\boldsymbol{\nabla})^* U_C^{-1} = i\hbar\boldsymbol{\nabla}, \tag{9}$$

$$U_C \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}^* U_C^{-1} = \begin{pmatrix} -\boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \tag{10}$$

was genau unseren Ersetzungen entspricht.
Physikalisch ist das mithilfe des Bilds des Dirac-Sees zu verstehen. Nach ihm müssen wir Anregungen bei negativen Energien als Löcher in den ansonsten vollständig besetzten Elektronzuständen auffassen. Die Abwesenheit eines Teilchens mit Energie $-E$ wird relativ zum Vakuum als Anwesenheit eines Teilchens mit Energie $+E$ interpretiert. Bewegen sich zudem die Teilchen bei negativen Energien mit Impuls $\boldsymbol{p}$, so bewegt sich das Loch, das sie hinterlassen mit Impuls $-\boldsymbol{p}$, und entsprechendes gilt für Drehimpulse wie bspw. dem Spin.

b) ∂_μ und A_μ transformieren als Vektoren. Setzen wir

$$\partial_\mu = \partial'_\nu \Omega^\nu{}_\mu, \qquad A_\mu = A'_\nu \Omega^\nu{}_\mu, \qquad \Psi(\Omega^{-1}x') = S^{-1}(\Omega)\Psi'(x') \tag{11}$$

in die modifizierte Dirac-Gleichung ein, finden wir

$$\left[\Omega^\nu{}_\mu \gamma^\mu \left(i\hbar\partial'_\nu - \frac{q}{c}A'_\nu\right) - \frac{\kappa_p \hbar q}{4mc^2}\Omega^\alpha{}_\mu \Omega^\beta{}_\nu \sigma^{\mu\nu} F'_{\alpha\beta} - mc\right] S^{-1}\Psi' = 0. \tag{12}$$

S ist definiert über die Beziehung

$$\Omega^{\nu}{}_{\mu}\gamma^{\mu} = S^{-1}\gamma^{\nu}S, \tag{13}$$

woraus außerdem folgt

$$\begin{aligned}\Omega^{\alpha}{}_{\mu}\Omega^{\beta}{}_{\nu}\sigma^{\mu\nu} &= \frac{i}{2}\Omega^{\alpha}{}_{\mu}\Omega^{\beta}{}_{\nu}\left(\gamma^{\mu}\gamma^{\nu} - \gamma^{\nu}\gamma^{\mu}\right) = \frac{i}{2}\left(S^{-1}\gamma^{\alpha}SS^{-1}\gamma^{\beta}S - S^{-1}\gamma^{\beta}SS^{-1}\gamma^{\alpha}S\right) \\ &= S^{-1}\sigma^{\alpha\beta}S.\end{aligned} \tag{14}$$

Einsetzen dieser beider Beziehungen in obige Gleichung liefert

$$S^{-1}\left[\gamma^{\nu}\left(i\hbar\partial'_{\nu} - \frac{q}{c}A'_{\nu}\right) - \frac{\kappa_p\hbar q}{4mc^2}\sigma^{\alpha\beta}F'_{\alpha\beta} - mc\right]SS^{-1}\Psi' = 0 \tag{15}$$

und nach multiplizieren von links mit S haben wir die Forminvarianz gezeigt.

c) Um den gyromagnetischen Faktor zu bestimmen, können wir uns o.B.d.A. auf ein homogenes magnetisches Feld in z-Richtung beschränken ($\Phi = 0$, $\boldsymbol{B} = B_z\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{z}}$) und $\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r}$ wählen. Der Feldstärketensor lautet dann

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -B_z & 0 \\ 0 & B_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{16}$$

und es gilt folglich in der Dirac-Darstellung

$$\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu} = B_z(\sigma^{21} - \sigma^{12}) = 2iB_z\gamma^2\gamma^1 = -2B_zI_2 \otimes \sigma_z. \tag{17}$$

Schreiben wir wieder $\Psi = \binom{\varphi}{\chi}$ und definieren $\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}/c$, so folgt

$$\begin{cases} (E - mc^2 + \frac{\kappa_p\hbar q}{2mc}B_z\sigma_z)\varphi = c(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})\chi, \\ (E + mc^2 + \frac{\kappa_p\hbar q}{2mc}B_z\sigma_z)\chi = c(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})\varphi. \end{cases} \tag{18}$$

Mit der nicht-relativistischen Näherung $\chi \approx (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})\varphi/(2mc)$ sowie $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})^2 = \boldsymbol{\pi}^2 - q\hbar/cB_z\sigma_z$ folgt schließlich

$$H = \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2m} - \frac{\hbar q}{2mc}(1+\kappa_p)B_z\sigma_z = \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2m} - \frac{\hbar q}{2mc}(2+2\kappa_p)B_zS_z. \tag{19}$$

Hier können wir den gyromagnetischen Faktor ablesen

$$g_p = 2(1+\kappa_p) \stackrel{!}{=} 5.59 \quad \Rightarrow \quad \kappa_p = 1.795. \tag{20}$$

2. Spin-Bahn-Kopplung **(8 Punkte)**

Die Spin-Bahn-Kopplung wird durch einen Hamiltonoperator der Form $H_{\mathrm{LS}} \propto \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ beschrieben, mit (Bahn-)Drehimpulsoperator $\boldsymbol{L}$ und Spinoperator $\boldsymbol{S}$. In dieser Aufgabe betrachten wir den (nicht-relativistischen) Hamiltonoperator H_0 eines Elektrons im Wasserstoffatom, zu dem wir die Spin-Bahn-Kopplung (in vereinfachter Form im Vergleich zu dem, wie sie aus der Dirac-Gleichung folgt) als eine kleine Störung addieren

$$H = H_0 + \frac{\lambda}{ma_0^2}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}, \qquad \lambda \ll 1. \tag{21}$$

a) Für die Lösung im nicht-relativistischen Fall nutzen wir üblicherweise, zusätzlich zur Hauptquantenzahl n, die Quantenzahlen l und m_l, jeweils assoziert mit den Operatoren $\boldsymbol{L}^2$ und L_z, sowie s und m_s, jeweils assoziert mit $\boldsymbol{S}^2$ und S_z. Begründen Sie, warum $\{n, l, m_l, s, m_s\}$ für den Hamiltonian in (21) kein "guter" Satz an Quantenzahlen mehr ist. (1 Punkt)

b) Führen Sie den Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$ ein und begründen Sie, dass wir stattdessen die Quantenzahlen $\{n, l, j, m_j, s\}$ nutzen können. Zeigen Sie dafür, dass

$$\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{S} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{S}^2\right). \qquad \text{(3 Punkte)} \tag{22}$$

c) Finden Sie die Korrekturen zu den Eigenenergien der Wasserstoff-Eigenzustände $|n, l, j, m_j\rangle$ in erster Ordnung in λ. Bestimmen Sie den resultierenden Entartungsgrad der Zustände mit $n = 2$. (4 Punkte)

Lösungsvorschlag

a) Da $\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{S} = L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z$ und $[L_i, L_j] \neq 0 \neq [S_i, S_j]$ falls $i \neq j$, kommutieren L_z und S_z nicht mit dem Hamiltonian in (21), sind damit keine Erhaltungsgrößen und m_l und m_s keine guten Quantenzahlen.

b) Es ist

$$\boldsymbol{J}^2 = \boldsymbol{L}^2 + \boldsymbol{S}^2 + 2\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{S} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{S} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{S}^2\right), \tag{23}$$

womit wir schreiben können

$$H = H_0 + \frac{\lambda}{2ma_0^2}\left(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{S}^2\right). \tag{24}$$

Da $[\boldsymbol{L}^2, L_i] = [\boldsymbol{S}^2, S_i] = [\boldsymbol{J}^2, J_i] = 0$, gilt auch $[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{L}^2] = [\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{S}^2] = 0$ sowie $[J_z, \boldsymbol{L}^2] = [J_z, \boldsymbol{S}^2] = 0$. Da H_0 nur mit $\boldsymbol{L}^2$ von den Winkelkoordinaten abhängt, ist auch $[\boldsymbol{J}^2, H_0] = [J_z, H_0] = 0$. Das Quadrat des Gesamtdrehimpulses $\boldsymbol{J}^2$ und seine z-Projektion J_z sind also auch mit Spin-Bahn-Kopplung Erhaltungsgrößen und wir können j und m_j, anstelle von m_l und m_s, in unseren Satz an Quantenzahlen aufnehmen.

c) Die Energie-Korrekturen in erster Ordnung ergeben sich aus den Erwartungswerten des Störoperators

$$E^{(1)}_{n,l,j,m_j,s} = \frac{\lambda}{ma_0^2}\langle n, l, j, m_j, s|\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{S}|n, l, j, m_j, s\rangle \tag{25}$$

$$= \frac{\lambda}{2ma_0^2}\langle n, l, j, m_j, s|\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{S}^2|n, l, j, m_j, s\rangle \tag{26}$$

$$= \frac{\lambda\hbar^2}{2ma_0^2}\left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right), \tag{27}$$

wobei wir genutzt haben, dass für ein Elektron mit $s = 1/2$, $s(s+1) = 3/4$. Wir sehen direkt, dass die Korrekturen unabhängig von m_j sind. Im $n = 2$-Unterraum lauten damit die korrigierten Energien (zur Erinnerung: $l = 0, 1, \ldots, n-1$)

$$E_{n=2,l,j} = -\frac{R_y}{4} + \frac{\lambda\hbar^2}{2ma_0^2} \times \begin{cases} 0, & l = 0,\ j = 1/2, \\ -2, & l = 1,\ j = 1/2, \\ 1, & l = 1,\ j = 3/2. \end{cases} \tag{28}$$

m_j kann die Werte $-j, -j+1, \ldots, j$ annehmen. Damit sind die beiden Energieniveaus mit $j = 1/2$ zweifach entartet, während das Energieniveau mit $j = 3/2$ vierfach entartet ist.

Hinweis: Dies entspricht nicht den Entartungsgraden, wie sie im Wasserstoffatom tatsächlich vorliegen, da es noch weitere Korrekturen von der Größenordnung der Spin-Bahn-Kopplung gibt, die wir hier nicht berücksichtigt haben. Speziell der sogenannte Darwin-Term hebt die Aufspaltung zwischen den beiden $j = 1/2$-Niveaus wieder auf (auf diesem Level der Störungstheorie).