

Diplomarbeit

Mathematische Aspekte der Foldy-Wouthuysen-Transformation

ausgeführt am

Institut für Analysis und Technische Mathematik
der Technischen Universität Wien

unter Anleitung von

O. Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr. rer. nat. Heinz Langer

durch

Mario Sedlak
Bernoullistr. 4/11/12
1220 Wien

Inhalt

Vorwort	3
1. Einführung	4
1.1 Grundgedanken der Quantentheorie	4
1.2 Physikalische Motivation der Dirac-Gleichung	5
1.3 Bemerkungen zur Physik der Dirac-Gleichung	8
2. Foldy-Wouthuysen-Transformation für ein freies Teilchen.....	10
2.1 Motivation und Beweis	10
2.2 Bemerkungen zur Foldy-Wouthuysen-Transformation	12
2.3 Mathematische Begriffsbildungen zur Foldy-Wouthuysen-Transformation.....	13
2.4 Dirac-Operatoren mit Supersymmetrie	15
2.5 Polardarstellung des ungeraden Anteils	16
2.6 Die abstrakte Foldy-Wouthuysen-Transformation	17
2.7 Darstellungen mit Winkeloperatoren.....	19
3. Sukzessive Foldy-Wouthuysen-Transformation (für ein Teilchen in einem Feld). 22	
3.1 Die Dirac-Gleichung für ein Teilchen in einem Feld.....	22
3.2 Herleitung der sukzessiven Foldy-Wouthuysen-Transformation.....	24
3.3 Bemerkungen zur sukzessiven Foldy-Wouthuysen-Transformation.....	27
3.4 Die sukzessive Foldy-Wouthuysen-Transformation in Matrixdarstellung.....	28
3.5 Diagonaldarstellung mit Winkeloperatoren	32
3.6 Konvergenzfragen.....	33
3.7 Im Fall der Supersymmetrie	34
3.8 Andere Methoden	36
Literatur	38

Vorwort

In dieser Arbeit soll die Dirac-Gleichung mit Ergebnissen der Theorie der Operator-Matrizen der Gestalt

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & -D \end{pmatrix} \quad (1)$$

betrachtet werden. Im einfacheren Fall der Dirac-Gleichung für ein freies Teilchen lässt sich eine unitäre Transformation angeben, genannt Foldy-Wouthuysen-Transformation, die (1) diagonalisiert. Für die Dirac-Gleichung, die ein Teilchen in einem äußeren elektromagnetischen Feld beschreibt, kennen die Physiker eine Folge von unitären Transformationen, ebenfalls Foldy-Wouthuysen-Transformation genannt, die die zugehörige Matrixdarstellung von der Form (1) in jedem Schritt in gewissem Sinne „näher“ an die Diagonalgestalt bringt. Zentrale Frage in der vorliegenden Diplomarbeit ist, ob man dieses Verfahren in die allgemeine Theorie der Operator-Matrizen übertragen kann.

Ich habe mich bemüht, dem Mathematiker einen kurzen und prägnanten Einblick in die Denkweisen der Physiker zu geben. In Hinblick auf den beschränkten Platz sind physikalische Ergebnisse meist in sehr knapper Form und teilweise stark vereinfacht wiedergegeben. Der interessierte Leser sei auf die große Menge an einführender Literatur verwiesen (z. B. [B], [G], [M], [St], [Y] sowie jedes andere Lehrbuch über relativistische Quantenmechanik oder Quantenfeldtheorie). Im Gegensatz dazu gibt es nur sehr wenig Literatur, in der sowohl die physikalische Dirac-Theorie als auch die Theorie der Operator-Matrizen diskutiert und in Beziehung zueinander gesetzt werden (Standardquellen hierfür sind [T] und [LT]).

Ich glaube, ich habe mir nicht das leichteste Thema für eine Diplomarbeit ausgesucht (zumal das genaue Thema gar nicht von Anfang an feststand), dafür aber ein recht interessantes. Für mich war es eine spannende Aufgabe, dasselbe Thema sowohl aus der Sicht des Mathematikers als auch des Physikers kennen zu lernen und aufzuarbeiten. Meine Hoffnung ist, einen bescheidenen Beitrag dafür zu leisten, dass Disziplingrenzen ein Stück mehr überwunden werden, um einen fruchtbaren Erfahrungsaustausch anzukurbeln, der durch gegenseitige Ergänzung zu neuen Ergebnissen und tieferem Verständnis führt.

Ich habe meinem Betreuer Prof. Heinz Langer zu danken. Es war eine Freude, mit ihm zu arbeiten. Weiters danke ich den Professoren Balasin, Burgdörfer, Dirl, Grau, Havlicek, Herfort, Kummer, Pongratz, Schweda und Seke für freundliche Auskünfte auf meine Fragen.

Wien, Jänner 2000

1. Einführung

In diesem Kapitel werden in knapper Form die physikalischen Hintergründe erläutert, die zum Dirac-Operator und der berühmten Foldy-Wouthuysen-Transformation führen. Obwohl kaum unmittelbar mathematisch anwendbar, erweisen solche Zusatzinformationen wertvolle Dienste, wenn es etwa darum geht, die von Physikern benutzten Verfahren zu verstehen und einzuschätzen, an welcher Stelle man als Mathematiker etwas anders machen könnte, um *mathematisch* interessante Ergebnisse abzuleiten. Auch aus reinem Interesse ist so ein Blick über Disziplingrenzen hinweg auf jeden Fall motiviert.

1.1 Grundgedanken der Quantentheorie

Auf atomarer und subatomarer Ebene sind die klassischen physikalischen Gesetze nicht mehr gültig. Man benötigt ein vollkommen andersartiges Modell, um die in diesem Größenbereich auftretenden Vorgänge zu beschreiben. Es handelt sich hierbei um die Quantentheorie, die ihren Namen davon hat, dass Energien und andere physikalische Größen bei gebundenen Systemen (z. B. einem Atom) nicht kontinuierlich viele sondern nur bestimmte diskrete Werte annehmen können.

Direkt messbare physikalische Größen (z. B. Energie, Ort, Geschwindigkeit) bezeichnet man als **Observablen**. Jeder physikalischen Observablen wird ein linearer selbstadjungierter Operator zugeordnet. Das Ergebnis einer Messung einer physikalischen Observablen ist irgendeiner der Eigenwerte des zugehörigen Operators. Zwei Operatoren kommutieren genau dann, wenn die ihnen entsprechenden physikalischen Größen zugleich mit theoretisch beliebiger Genauigkeit gemessen werden können. Orts- und Impulsoperatoren kommutieren nicht, das ist in anderen Worten das berühmte Heisenberg'sche Unbestimmtheitsprinzip.

Unter einem **vollständigen Satz vertauschbarer Operatoren** versteht man eine Menge von selbstadjungierten Operatoren (wir diskutieren in der ganzen Arbeit nur lineare Operatoren, deshalb weisen wir auf die Linearität nicht immer explizit hin), die paarweise kommutieren, es aber keinen weiteren selbstadjungierten Operator gibt, der mit allen kommutiert. Solche vollständigen Sätze vertauschbarer Operatoren liefern einen wichtigen **Entwicklungssatz**: Man kann mit Hilfe der Eigenvektoren ψ_n der vorkommenden Operatoren jeden möglichen Vektor ψ darstellen:

$$\psi = \sum_n a_n \psi_n \quad (1.1)$$

Gibt es überabzählbare viele Eigenvektoren, dann wird die Reihe (1.1) zu dem Integral

$$\psi = \int_n a(n) \psi(n) dn . \quad (1.2)$$

Jeder Vektor ψ entspricht genau einem wohldefinierten Zustand des physikalischen Systems. Die Umkehrung gilt, wenn man nur normierte Vektoren (oder – gleichwertig – alle ein-

dimensionalen Unterräume) zulässt. Die Vektoren ψ werden von Physikern üblicherweise **Wellenfunktionen** genannt. Dabei handelt es sich um komplexe Funktionen $\psi = \psi(\mathbf{s})$ von allen Freiheitsgraden $\mathbf{s} \in \mathbb{Q}^n$. Der Wert $|\psi(\mathbf{s})|^2 \geq 0$ wird als Wahrscheinlichkeit interpretiert, dass das System bei einer Messung im Zustand \mathbf{s} vorgefunden wird. Bei überabzählbar vielen möglichen Zuständen, $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$, ist $|\psi(\mathbf{s})|^2$ eine Wahrscheinlichkeitsdichte, d. h. die Wahrscheinlichkeit, dass das System bei einer Messung in irgendeinem Zustand einer kleinen Umgebung von \mathbf{s} vorgefunden wird, ist näherungsweise proportional zu $|\psi(\mathbf{s})|^2$. Eine Verallgemeinerung auf beliebige Teilmengen von \mathbb{R}^n („Born’s statistical interpretation“) findet man bei [T], S. 5f.

Beispiel 1.1. Sei $\psi = \psi(\mathbf{r})$, $\mathbf{r} = (x, y, z)^\top$, eine Wellenfunktion, die nur vom Ort im dreidimensionalen Raum abhängt. Sie soll den Ort *eines* Teilchens repräsentieren. Dann ist

$$\int_V |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$$

die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Bereich V zu finden.

Alles, was man über ein quantenmechanisches System wissen *kann*, wird durch die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{s})$, die den momentanen Zustand des Systems repräsentiert, angegeben. Den Zustand des Systems zu einem späteren Zeitpunkt beschreibt die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi,$$

wobei $\psi = \psi(\mathbf{s}, t)$ jetzt auch als Funktion von t aufgefasst wird und H ein bestimmter, der physikalischen Situation entsprechender selbstadjungierter Operator ist. Er repräsentiert die Energie; seine Eigenwerte sind die möglichen Ergebnisse einer Messung der Energie des Systems. Man nennt ihn Hamilton-Operator (engl.: Hamiltonian).

Die Wellenfunktionen nennt man in der Dirac-Theorie auch **Spinoren**. Diese Bezeichnung stammt daher, dass man derartige Wellenfunktionen erstmals zur Beschreibung des Spins eines Teilchens einführte. Sie besitzen ein bestimmtes Transformationsverhalten unter Koordinatentransformationen, was uns in dieser Arbeit jedoch nicht interessiert.

Der Raum aller Wellenfunktionen ist ein Funktionenraum mit den Eigenschaften eines komplexen Hilbertraumes, meist von der Art $L^2(\mathbb{R}^N)$. Es ist typisch für die Denkweisen von Physikern, dass der mathematische Raum, in dem sich alles abspielt, von untergeordneter Bedeutung ist. Oft wird er daher gar nicht oder so wie hier erst beiläufig am Rande erwähnt.

1.2 Physikalische Motivation der Dirac-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung gilt nur für ein System, in dem weder ein Spin (entspräche klassisch einer Eigendrehung der Teilchen) noch hohe Energien (insbesondere hohe Geschwindigkeiten) vorkommen. Die Pauli-Gleichung behebt den ersten Mangel: Sie berücksichtigt auch Spin (und erfordert dafür zweikomponentige Wellenfunktionen). Es bleibt die zweite Einschränkung (keine hohen Energien), die nichts anderes sagt, als dass relativistische

Effekte vernachlässigt werden. Die Schrödinger- und Pauli-Gleichung gelten daher nur im nichtrelativistischen Grenzfall exakt.

Nun ist die Schrödinger-Gleichung mit der Relativitätstheorie nicht vereinbar, es muss daher eine völlig neue Zustandsgleichung gesucht werden. An sie werden eine Reihe von Forderungen gestellt, wovon die wichtigsten sind:

- Es existiert auch weiterhin eine Zustandsfunktion, die alles zusammenfasst, was wir über das physikalische System wissen können.
- Die Zustandsgleichung muss die vom Relativitätsprinzip geforderten Invarianzeigenschaften besitzen (z. B. sollten Raum- und Zeitkoordinaten in symmetrischer Weise vorhanden sein).
- Sie soll linear sein, damit das Superpositionsprinzip gilt.
- Es sollen nur Ableitungen erster Ordnung vorkommen, weil sonst eine nicht-lokale Theorie die Folge wäre.

Ausgangspunkt ist die klassische relativistische Energie-Impuls-Beziehung

$$E = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}, \quad (1.3)$$

worin E die Gesamtenergie, c die Lichtgeschwindigkeit, p den Betrag des Impulses und m die Ruhemasse eines Systems (wir betrachten ein einzelnes Teilchen) bezeichnet. Nun benutzt der Physiker das Korrespondenzprinzip, das schon in der nichtrelativistischen Quantentheorie erfolgreich verwendet wurde, um aus klassischen Beziehungen Ausdrücke für quantenmechanische Operatoren zu erhalten. Es handelt sich hierbei um die Substitutionen

$$\begin{aligned} E &\mapsto i\hbar \frac{\partial}{\partial t} & (\hbar = \text{Plank'sches Wirkungsquantum}) \\ \mathbf{p} &\mapsto -i\hbar \nabla & (\nabla = \text{Nabla-Operator}) \end{aligned} \quad (1.4)$$

sowie weitere, die wir momentan nicht verwenden. Wendet man (1.4) auf (1.3) an, so erhält man einen Wurzeloperator, mit dem nicht nur schwer zu rechnen ist, sondern auch eine nicht-lokale Theorie folgen würde. Deshalb linearisiert man ihn und kommt auf den Ansatz

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i} \left(\alpha_1 \frac{\partial \psi}{\partial x_1} + \alpha_2 \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + \alpha_3 \frac{\partial \psi}{\partial x_3} \right) + \beta m c^2 \psi. \quad (1.5)$$

Die Koeffizienten α_i können nicht einfach Zahlen sein, da die Gleichung sonst nicht einmal gegen räumliche Drehung invariant wäre. Ebenso kann auch die Wellenfunktion ψ nicht ein einfacher Skalar sein. Daraus folgt, dass (1.5) als Matrix-Gleichung interpretiert werden muss: α_i und β sind $N \times N$ -Matrizen (wir unterscheiden nicht zwischen Matrizen und Operatoren) und ψ ist ein Element des komplexen Vektorraums $L^2(\mathbb{R})^N$. Die Matrizen α_i und β müssen so gewählt werden, dass folgende Bedingungen erfüllt sind:

- Nach zweimaliger Iteration muss (1.5) die richtige Energie-Impuls-Beziehung liefern.
- Die Matrizen müssen selbstadjungiert sein, damit auch der Dirac-Operator selbstadjungiert wird.

Die kleinste Dimension, in der man alle Bedingungen erfüllen kann, ist 4. Die Matrizen sind nicht eindeutig bestimmt; eine Lösung ist

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (1.6)$$

wobei die $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ die wohlbekanntenen Pauli-Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

sind. Jeder Eintrag in (1.6) ist eine 2×2 -Matrix, insbesondere ist 1 bzw. 0 die 2×2 -Einheits- bzw. -Nullmatrix. Man erhält weitere Lösungen, wenn man eine beliebige unitäre Koordinatentransformation vornimmt. (Es gilt sogar die Umkehrung, genannt Pauli'scher Fundamentalsatz – siehe [G], S. 154–160.) Damit kommt man auf andere Darstellungsmöglichkeiten. (Beispiele siehe z. B. bei [T], S. 35f.) Wie man auf eine Lösung für die Matrizen α_i und β kommt, ist in jedem Lehrbuch der relativistischen Quantenmechanik ausgeführt und wird hier daher nicht reproduziert (siehe z. B. [T], S. 2f.).

Die Dirac-Gleichung sieht nun so aus:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H \psi \quad (1.7)$$

mit dem Dirac-Operator

$$H = c \alpha \cdot p + \beta mc^2. \quad (1.8)$$

H und p_i sind Operatoren, α_i und β sind Matrizen, also auch Operatoren. In der Matrixdarstellung sieht die Dirac-Gleichung folgendermaßen aus:

$$\tilde{A}_0 = \begin{pmatrix} mc^2 & -i\hbar c \sigma \cdot \nabla \\ -i\hbar c \sigma \cdot \nabla & -mc^2 \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

Die Notation $\sigma \cdot \nabla$ ist erklärungsbedürftig: σ ist hier der formale Vektor $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)^\top$. Wenn wir die Komponenten eines Vektors in \mathbb{R}^3 mit x, y und z bezeichnen, dann schreibt sich der Nabla-Operator als $\nabla = (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)^\top$. Somit heißt $\sigma \cdot \nabla$ explizit

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \\ \partial/\partial z \end{pmatrix} = \sigma_1 \frac{\partial}{\partial x} + \sigma_2 \frac{\partial}{\partial y} + \sigma_3 \frac{\partial}{\partial z} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial y} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial z}$$

und (1.9) bedeutet ausführlich geschrieben:

$$\begin{pmatrix} mc^2 & 0 & -i\hbar c \frac{\partial}{\partial z} & -i\hbar c \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ 0 & mc^2 & -i\hbar c \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) & i\hbar c \frac{\partial}{\partial z} \\ -i\hbar c \frac{\partial}{\partial z} & -i\hbar c \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) & -mc^2 & 0 \\ -i\hbar c \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) & i\hbar c \frac{\partial}{\partial z} & 0 & -mc^2 \end{pmatrix}. \quad (1.10)$$

Die Darstellung (1.9) hat den Vorteil, dass sie nicht nur für $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)^\top$ sondern für jedes unitär-äquivalente Matrixensystem gilt.

Der Definitionsbereich $D(H)$ des Dirac-Operators (1.8) ist der erste Sobolev-Raum $H^1(\mathbb{R}^3)^4$; dieser ist ein natürlicher Definitionsbereich für Differentialoperatoren 1. Ordnung ([T], S. 7). Der Dirac-Operator (1.8) ist wesentlich selbstadjungiert auf dem dichten Teilraum $C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})^4$ ([T], S. 11).

1.3 Bemerkungen zur Physik der Dirac-Gleichung

Bemerkung 1.2. Die Dirac-Gleichung ist nicht die einzige a priori vernünftige Zustandsgleichung, sondern nur durch die Verifikation im Experiment ausgezeichnet.

Bemerkung 1.3. Die Gleichung (1.7) gilt für ein *freies* Teilchen; Potentiale werden erst im Kapitel 3 berücksichtigt.

Bemerkung 1.4. Wie sich herausstellt, gilt die Dirac-Gleichung genau für Elementarteilchen vom Spin 1/2 (die man daher auch Dirac-Teilchen nennt). Die bekanntesten Vertreter dieser Teilchenart sind das Proton, Neutron und Elektron. Wirklich nützlich ist die Dirac-Gleichung jedoch nur für das Elektron, denn bei Proton und Neutron wirken auch und vor allem Kernkräfte, deshalb ist die Dirac-Gleichung alleine nur für das Elektron eine brauchbare Näherung (vgl. [St], S. 113). Außerdem sind Protonen und Neutronen zusammengesetzte Teilchen: Sie bestehen jeweils aus drei Quarks, die jedes für sich wieder ein Spin-1/2-Teilchen sind (ebd.). Die Dirac-Gleichung kann aber nur *ein* Teilchen adäquat beschreiben; es gibt keine befriedigende Zweikörper-Dirac-Gleichung ([G], S. 287).

Bemerkung 1.5. Wenn man auf das Quadrat der Energie-Impuls-Beziehung (1.3) das Korrespondenzprinzip (1.4) anwendet, erhält man die Klein-Gordon-Gleichung, die für Spin-0-Teilchen (d. h. Teilchen ohne Spin) gilt. Die Klein-Gordon-Gleichung ist eine Differentialgleichung 2. Ordnung; der Spin kommt offenbar durch die Linearisierung (1.5) ebendieser in die Theorie ([G], S. 147).

Für ein freies Teilchen lassen sich die Lösungen der Dirac-Gleichung leicht bestimmen. Der einfachste Fall ist der des ruhenden Elektrons. Hier gibt es die vier Lösungen

$$\begin{aligned} \psi_{(1)} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i(mc^2/\hbar)t}, & \psi_{(2)} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i(mc^2/\hbar)t}, \\ \psi_{(3)} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{+i(mc^2/\hbar)t}, & \psi_{(4)} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{+i(mc^2/\hbar)t}. \end{aligned}$$

Die Wellenfunktion für ein ruhendes Elektron ist nicht vom Ort \mathbf{r} abhängig. Das ist in Übereinstimmung mit dem Heisenberg'schen Unbestimmtheitsprinzip: Der Impuls ist exakt bekannt, also muss der Ort total unbestimmt sein. (Die Aufenthalts-Wahrscheinlichkeitsdichte-Interpretation von ψ ist in diesem Sonderfall nicht möglich.) Die ersten beiden Wellenfunktionen gehören zu positiver, die letzten beiden zu negativer Energie (Antiteilchen).

Aus den Lösungen für ein ruhendes Elektron kann man durch Lorentz-Transformation oder auch direkt die Lösungen für beliebigen Impuls berechnen. Jede solche Lösung hat die Gestalt

$$\psi = U(\mathbf{p}) \exp(i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar),$$

wobei $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ die Energie ist und $U(\mathbf{p})$ einer von vier möglichen Spinoren ist ([St], S. 131; [M], S. 398; [B], S. 44; [G], S. 125, 128).

Überlagerungen von Wellenfunktionen, die nur in einem endlichen Gebiet wesentlich von Null verschieden sind, nennt man in der Physik **Wellenpakete**. Sind alle Teilwellen des Wellenpakets Lösungen der Dirac-Gleichung, so ist wegen der Linearität natürlich auch das Wellenpaket Lösung der Dirac-Gleichung (mehr z. B. bei [G], S. 213–226). In [TNC] wird der zeitliche Verlauf von Wellenpaketen unter der Dirac-Gleichung in einer Raumdimension berechnet.

In der Literatur findet man eine große Menge von Operatoren, die verschiedenen Observablen entsprechen, sowie viele Projektions- und Symmetriepoperatoren. Da wir sie in dieser Arbeit nicht benötigen, verweise ich auf die Literatur (z. B. [St], S. 157ff.; [M], S. 383ff.; [T], S. 7f.; [V], S. 161f.; [G], S. 130f.). Exemplarisch soll nur eine Komponente des Ortsoperators (X, Y, Z), der ja eigentlich wie der Impuls p ein Tripel von Operatoren ist, angegeben werden:

$$X: \psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \\ \psi_3(\mathbf{r}) \\ \psi_4(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} x\psi_1(\mathbf{r}) \\ x\psi_2(\mathbf{r}) \\ x\psi_3(\mathbf{r}) \\ x\psi_4(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

Wie man sieht, handelt es sich um einen einfachen Multiplikationsoperator. Sein Definitionsbereich ist

$$\mathcal{D}(X) = \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}^3)^4 \mid \int_{\mathbb{R}^3} \sum_{k=1}^4 |x\psi_k(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} < \infty \right\}$$

([T], S. 7).

Ab jetzt setzen wir $\hbar = c = 1$.

2. Foldy-Wouthuysen-Transformation für ein freies Teilchen

2.1 Motivation und Beweis

Die Dirac-Gleichung ist ein verkoppeltes System von vier Differentialgleichungen. Für festes Vorzeichen der Energie sind mindestens drei Komponenten der Wellenfunktion ungleich Null. Jedoch gehen zwei der vier Komponenten gegen Null, wenn der Betrag des Impulses p gegen Null geht ([FW], S. 29; [St], S. 112). So sollte es auch sein, denn im nichtrelativistischen Grenzfall muss die Dirac-Gleichung in die Pauli-Gleichung übergehen – und die hat nur zwei Komponenten. Weil die Dirac-Gleichung Operatoren enthält, die große und kleine Komponenten verkoppelt, kann man jedoch nicht so ohne weiteres die kleinen Komponenten näherungsweise weglassen. Wir führen dazu eine Definition ein.

Definition 2.1. Kommutiert ein Operator T mit der Involution β , d. h. $T\beta = \beta T$, dann sagen wir: T ist **gerade**. Antikommutiert ein Operator T mit der Involution β , d. h. $T\beta = -\beta T$, dann sagen wir: T ist **ungerade**.

Ist der Definitionsbereich von T nicht der ganze Raum, dann soll die Relation $T\beta\psi = \pm\beta T\psi$ für alle ψ aus dem Definitionsbereich von T , für die auch $\beta\psi$ im Definitionsbereich von T ist, gelten. Das Produkt von zwei geraden oder zwei ungeraden Operatoren ist ein gerader Operator; das Produkt von einem geraden und einem ungeraden Operator ist ungerade. In der 2×2 -Matrixdarstellung sind gerade bzw. ungerade Operatoren genau jene, die Diagonal- bzw. Nebendiagonal-Gestalt haben.

Die störenden Operatoren sind die ungeraden. Wenn man es schafft, den ungeraden Anteil am Dirac-Operator wegzutransformieren, könnte man die kleinen Komponenten einfach vernachlässigen und erhielte die gewünschte Zwei-Komponenten-Theorie. Die vier verkoppelten Differentialgleichungen, aus denen die Dirac-Gleichung besteht, wären in zwei zweikomponentige Gleichungen entkoppelt. Dieses Vorhaben ist gleichbedeutend damit, die 2×2 -Matrix (1.9) zu diagonalisieren (tatsächlich wird sogar die 4×4 -Matrix (1.10) diagonalisiert).

Wir suchen eine unitäre Transformation U , sodass

$$UHU^*$$

frei von ungeraden Operatoren ist, d. h. ein gerader Operator ist. Die Physiker schließen aufgrund von Analogien zu ähnlichen Problemen, dass folgender Ansatz lohnend sein könnte: ([B], S. 57)

$$U = e^{iS} = e^{\beta \alpha \cdot p \vartheta(p)} \tag{2.12}$$

Hierbei ist $\vartheta(p)$ irgendeine Funktion des Operators p , also selbst wieder ein Operator, erklärbar etwa durch den Funktionalkalkül für selbstadjungierte Operatoren (vgl. [FW], Fußnote 4). Sie soll später so gewählt werden, dass alle ungeraden Operatoren wegfallen.

Wir entwickeln $e^{\beta \alpha \cdot p \vartheta(p)}$ nach der Eulerschen Formel:

$$e^{\beta \alpha \cdot p \vartheta(p)} = \cos(i\beta \alpha \cdot p \vartheta(p)) - i \sin(i\beta \alpha \cdot p \vartheta(p))$$

Man rechnet leicht nach (in der Matrixdarstellung), dass $(\beta \alpha \cdot p)^2 = -|p|^2$ ist. Also ist das Argument zur n -ten Potenz $(i \frac{\beta \alpha \cdot p}{|p|} |p| \vartheta(p))^n = (|p| \vartheta(p))^n$ für alle geraden Potenzen n . Daher kann der Ausdruck $i \frac{\beta \alpha \cdot p}{|p|}$ im Cosinus-Argument weggelassen werden. Wenn alle geraden Potenzen von $i \frac{\beta \alpha \cdot p}{|p|}$ gleich 1 sind, dann sind alle ungeraden gleich $i \frac{\beta \alpha \cdot p}{|p|}$. Das bedeutet, dass sich dieser Ausdruck aus dem Sinus herausheben lässt. Insgesamt haben wir den gesuchten Transformationsoperator U jetzt so dargestellt:

$$U = \cos |p| \vartheta(p) + \frac{\beta \alpha \cdot p}{|p|} \sin |p| \vartheta(p)$$

Damit wird H jetzt transformiert (eine mathematisch exakte Rechnung folgt im Kapitel 2.6):

$$\begin{aligned} UHU^* &= \left(\cos |p| \vartheta(p) + \frac{\beta \alpha \cdot p}{|p|} \sin |p| \vartheta(p) \right) (\beta m + \alpha \cdot p) \left(\cos |p| \vartheta(p) - \frac{\beta \alpha \cdot p}{|p|} \sin |p| \vartheta(p) \right) \\ &= (\beta m + \alpha \cdot p) \left(\cos |p| \vartheta(p) - \frac{\beta \alpha \cdot p}{|p|} \sin |p| \vartheta(p) \right)^2 \\ &= (\beta m + \alpha \cdot p) \exp(-2\beta \alpha \cdot p \vartheta) \\ &= \beta(m \cos 2|p| \vartheta + |p| \sin 2|p| \vartheta) + \alpha \cdot p \left(\cos 2|p| \vartheta - \frac{m}{|p|} \sin 2|p| \vartheta \right) \end{aligned}$$

Die letzte Klammer muss Null werden, d. h.

$$\begin{aligned} \cos 2|p| \vartheta &= \frac{m}{|p|} \sin 2|p| \vartheta \\ \Leftrightarrow \tan 2|p| \vartheta &= \frac{|p|}{m} \\ \Leftrightarrow \vartheta &= \frac{1}{2|p|} \arctan \frac{|p|}{m} \end{aligned}$$

Wenn $\tan 2|p| \vartheta = \frac{|p|}{m}$ ist, folgt aus den altbekannten Dreieckssätzen für Winkelfunktionen

leicht, dass $\sin 2|p| \vartheta = \frac{|p|}{\sqrt{m^2 + p^2}}$ und $\cos 2|p| \vartheta = \frac{m}{\sqrt{m^2 + p^2}}$ ist. (Für die positive Quadratwurzel

eines positiven Operators \tilde{P} schreiben wir statt $\tilde{P}^{1/2}$ auch $\sqrt{\tilde{P}}$.) Das liefert schließlich als transformierten Dirac-Operator

$$UHU^* = \beta \sqrt{m^2 + p^2}.$$

Wie gewünscht, enthält dieser keine ungeraden Terme mehr. Wir geben noch die Transformation U an:

$$\begin{aligned}
U &= \cos\left(\frac{1}{2} \arctan \frac{|p|}{m}\right) + \frac{\beta \alpha \cdot p}{|p|} \sin\left(\frac{1}{2} \arctan \frac{|p|}{m}\right) \\
&= \sqrt{\frac{m + \sqrt{m^2 + p^2}}{2\sqrt{m^2 + p^2}}} + \frac{\beta \alpha \cdot p}{\sqrt{2\sqrt{m^2 + p^2}} (m + \sqrt{m^2 + p^2})} \\
&= \frac{\alpha \cdot p}{\sqrt{2\sqrt{m^2 + p^2}} (m + \sqrt{m^2 + p^2})}
\end{aligned}$$

([V], S. 153; [FW], S. 31; [G], S. 317; [M], S. 414)

2.2 Bemerkungen zur Foldy-Wouthuysen-Transformation

Bemerkung 2.2. Es ist klar, dass in jeder der beiden Komponenten noch eine beliebige unitäre Transformation angewendet werden kann. Abgesehen davon ist die Foldy-Wouthuysen-Transformation jedoch eindeutig bestimmt. Das wurde von Pursey bewiesen (vgl. Rechnung bei [V], S. 176). Unter der Zusatzforderung, dass U translations-, rotations- und spiegelungsinvariant ist, ist U bis auf einen Phasenfaktor (= eine komplexe Zahl vom Betrag 1) eindeutig bestimmt ([M], S. 414).

Bemerkung 2.3. Aus der Foldy-Wouthuysen-Transformation erhält man das für einen Physiker interessante Ergebnis, dass die freie Dirac-Gleichung (1.7) unitär äquivalent zu einem Paar von (zweikomponentigen) Klein-Gordon-Gleichungen ist ([T], S. 11).

Bemerkung 2.4. Für ein freies Teilchen kann durch die Foldy-Wouthuysen-Transformation die Dirac-Gleichung stets in zwei Gleichungen entkoppelt werden. Dass die Entkopplung auch für hohe Impulse möglich sein muss, folgt aus der vorgeschriebenen Lorentz-Invarianz (alle Bezugssysteme sind gleichberechtigt, und es gibt immer eines, in dem der Impuls Null ist).

Bemerkung 2.5. Die gleichen physikalischen Observablen haben in der Foldy-Wouthuysen-Darstellung i. A. einen anderen sie repräsentierenden Operator. Der Ortsoperator (1.11) ist jetzt ein komplizierter Ausdruck (siehe [FW], S. 32); aus ihm kann man die so gen. Zitterbewegung ableiten: Das punktförmig angenommene Teilchen führt eine extrem rasche Oszillation um seine mittlere Lage aus. Wenn man jetzt der umgekehrten Frage nachgeht, was die Multiplikationsoperatoren (X , Y , Z), wenn wir sie als zur Foldy-Wouthuysen-Darstellung gehörend ansehen, als Gegenstück in der üblichen Darstellung besitzen, erhält man als Antwort einen neuen Operator (eigentlich ein Tripel von Operatoren), der als mittlere Lage identifiziert werden kann. Den expliziten Ausdruck dafür findet man z. B. bei [FW], S. 32. Er ist der einzige Ortsoperator, der die Räume der positiven und negativen Lösungen invariant lässt und kommutierende Komponenten besitzt. Er wird Newton-Wigner-Ortsoperator genannt (Näheres bei [T], S. 25f., 28).

Bemerkung 2.6. Die Foldy-Wouthuysen-transformierte Wellenfunktion an einem bestimmten Punkt hängt i. A. von den Werten der ursprünglichen Wellenfunktion in einer ganzen Umgebung ab. Diese Umgebung ist von der Größenordnung der Compton-Wellenlänge \hbar/mc des

Teilchens, in größeren Abständen davon heben sich die Beiträge im wesentlichen auf (Beweis bei [FW], S. 31f.).

Bemerkung 2.7. Die Foldy-Wouthuysen-Transformation lässt sich auch mit Hilfe der Fourier-Transformation definieren (siehe z. B. [T], S. 9–11).

Bemerkung 2.8. Analog zur Foldy-Wouthuysen-Transformation, die (1.9) auf Diagonalgestalt bringt, existiert eine unitäre Transformation auf Nebendiagonalgestalt, genannt Cini-Touschek-Transformation. Sie lässt sich sogar als Produkt von zwei Foldy-Wouthuysen-Transformationen darstellen (siehe [SSG] oder [T], S. 156). Während die Foldy-Wouthuysen-Transformation von Physikern zur Berechnung des nichtrelativistischen Limes (Ruheenergie \gg kinetische Energie) der Dirac-Gleichung (1.7) benutzt wird, verwenden sie die Cini-Touschek-Transformation zur Bestimmung des ultrarelativistischen Limes (Ruheenergie \ll kinetische Energie) der Dirac-Gleichung (1.7) (vgl. [V], S. 155f.). Die Foldy-Wouthuysen- und Cini-Touschek-Transformation kann man als Spezialfälle einer allgemeineren Transformation auffassen (siehe [V], S. 157f.).

2.3 Mathematische Begriffsbildungen zur Foldy-Wouthuysen-Transformation

Der Physiker interessiert sich dafür, ein Modell für die in der Wirklichkeit ablaufenden physikalischen Prozesse zu erhalten, das Voraussagen liefert und experimentell überprüft werden kann. Für den Mathematiker ist dagegen von essentieller Bedeutung, in welchem Raum die Operatoren wirken, welchen Definitionsbereich sie genau haben, wie man die Sätze verallgemeinern kann, was die wesentlichen Annahmen sind usw. Wir benutzen jetzt die in der mathematischen Literatur üblichen Bezeichnungen.

Es sei

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H} \oplus \hat{\mathcal{H}} \tag{2.13}$$

ein komplexer Hilbertraum mit fest vorgegebener orthogonaler Zerlegung in zwei abgeschlossene Teilräume. Oder anders gesehen: $\tilde{\mathcal{H}}$ ist das Produkt der Hilberträume \mathcal{H} und $\hat{\mathcal{H}}$. In dieser Sicht können \mathcal{H} und $\hat{\mathcal{H}}$ auch zwei Exemplare desselben Hilbertraums sein.

Definition 2.9. Unter einem **abstrakten Dirac-Operator** verstehen wir einen linearen Operator von $\tilde{\mathcal{H}}$ in $\tilde{\mathcal{H}}$, der sich in Matrixform schreiben lässt, wobei die Einträge Operatoren von \mathcal{H} bzw. $\hat{\mathcal{H}}$ in \mathcal{H} bzw. $\hat{\mathcal{H}}$ sind (1 = Identitätsoperator), und folgende Bedingungen erfüllt:

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & -D \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & B \\ B^* & 0 \end{pmatrix}}_{=: \tilde{Q}} + \underbrace{\begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & D \end{pmatrix}}_{=: \tilde{M}} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_{=: \tilde{J}} \quad (2.14)$$

$$\tilde{J} \mathcal{D}(\tilde{A}) = \mathcal{D}(\tilde{A}) \quad (2.15)$$

$$\tilde{A}^* = \tilde{A} \quad (2.16)$$

Bemerkung 2.10. Das „abstrakt“ bezieht sich nur auf den nicht näher spezifizierten Hilbertraum $\tilde{\mathcal{H}}$.

Operatoren, die sich als quadratische Matrix schreiben lassen, nennt man auch Block-Operator-Matrizen. Es gibt unbeschränkte Operatoren, die für eine vorgegebene Zerlegung (2.13) keine Matrixdarstellung gestatten. Ein Beispiel ist in [LT], Abschnitt 2.1 angegeben.

Bemerkung 2.11. Der Definitionsbereich eines abstrakten Dirac-Operators \tilde{A} ist in den interessanten Fällen sicher nicht der ganze Raum, weil \tilde{A} wie alle wichtigen Operatoren der Quantenmechanik unbeschränkt ist. Bei partiellen Operatoren (d. h. nicht auf dem ganzen Raum definierten Operatoren) muss man immer sehr vorsichtig sein, wenn man an ihnen formale Manipulationen durchführen will und dennoch rigorose mathematische Exaktheit wahren will. [K] hat dazu eine knappe und lehrreiche Übersicht zusammengestellt ([K], S. 163f.).

Für die Adjungierte einer dicht definierten 2×2 -Operator-Matrix gilt die Relation

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}^* \supset \begin{pmatrix} A^* & C^* \\ B^* & D^* \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

sie ist also eine Erweiterung der formal konjugiert-transponierten Operator-Matrix (ohne Beweis; vgl. [T], S. 142). Es gilt i. A. kein Gleichheitszeichen, da Summen von Adjungierten einen kleineren Definitionsbereich haben können als die Adjungierte des Summenoperators. Wie in der Operatorentheorie gezeigt wird, gilt das Gleichheitszeichen jedenfalls dann, wenn höchstens ein Operator der Summe unstetig ist (das ist trivial wenn alle Operatoren stetig sind, da man in diesem Fall aufgrund der eindeutigen stetigen Fortsetzbarkeit o. B. d. A. annehmen darf, dass sie überall definiert sind).

Daraus folgt, dass die Involution \tilde{J} selbstadjungiert und damit auch unitär ist:

$$\tilde{J}^{-1} = \tilde{J} = \tilde{J}^*$$

Aus (2.17) sieht man sofort: Wenn A und D symmetrisch sind, B eine Fortsetzung von C^* ist und C eine Fortsetzung von B^* ist, dann ist auch die aus ihnen gebildete Operator-Matrix symmetrisch. Man kann weiter zeigen:

$$\tilde{M} \text{ selbstadjungiert} \Leftrightarrow A \text{ und } D \text{ selbstadjungiert} \quad (\text{siehe [T], S. 141})$$

$$\tilde{Q} \text{ selbstadjungiert} \Leftrightarrow B \text{ abgeschlossen} \quad (\text{siehe [T], S. 142})$$

Vertauschungsrelationen:

$$\begin{aligned}\tilde{M}\tilde{J}\tilde{x} &= \tilde{J}\tilde{M}\tilde{x} & \forall \tilde{x} \in \mathcal{D}(\tilde{A}) = \mathcal{D}(\tilde{M}) \cap \mathcal{D}(\tilde{Q}) = \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B^*) + \mathcal{D}(B) \cap \mathcal{D}(D) \\ \tilde{Q}\tilde{J}\tilde{x} &= -\tilde{J}\tilde{Q}\tilde{x} & \forall \tilde{x} \in \mathcal{D}(\tilde{A})\end{aligned}$$

2.4 Dirac-Operatoren mit Supersymmetrie

Definition 2.12. Ein **Dirac-Operator mit Supersymmetrie** (man sagt auch *supersymmetrischer Dirac-Operator*) ist ein abstrakter Dirac-Operator $\tilde{A} = \tilde{Q} + \tilde{M}\tilde{J}$, der zusätzlich zu den Bedingungen (2.14)–(2.16) folgende Eigenschaften besitzt:

$$\tilde{M} \text{ und } \tilde{Q} \text{ sind selbstadjungiert} \quad (2.18)$$

$$\tilde{M} \text{ ist positiv, stetig, überall definiert und bijektiv mit stetiger Inverse } \tilde{M}^{-1} \quad (2.19)$$

$$\tilde{M}\mathcal{D}(\tilde{Q}) \subset \mathcal{D}(\tilde{Q}), \quad \tilde{M}\tilde{Q} = \tilde{Q}\tilde{M} \quad \text{auf } \mathcal{D}(\tilde{Q}) \quad (2.20)$$

Das bedeutet für die Einträge der Operator-Matrix:

A und D sind selbstadjungiert, B ist abgeschlossen

A und D sind positiv, stetig, überall definiert und bijektiv mit stetigen Inversen

$$D\mathcal{D}(B) \subset \mathcal{D}(B), \quad AB\tilde{x} = BD\tilde{x} \quad \forall \tilde{x} \in \mathcal{D}(B)$$

$$A\mathcal{D}(B^*) \subset \mathcal{D}(B^*), \quad DB^*\tilde{x} = B^*A\tilde{x} \quad \forall \tilde{x} \in \mathcal{D}(B^*)$$

Beispiele 2.13. Die Dirac-Operatoren für ein freies Teilchen sowie für ein Teilchen in einem reinen magnetischen Feld sind supersymmetrisch.

Bemerkung 2.14. Das Wesentliche an der Definition 2.12 ist die Forderung, dass \tilde{M} und \tilde{Q} vertauschen. Die meisten anderen Voraussetzungen wurden nur gewählt, weil sie in unseren Fällen immer erfüllt sind und die weiteren Herleitungen vereinfachen (vgl. [T], S. 150).

Behauptung 2.15. \tilde{A}^2 ist selbstadjungiert und $\tilde{A}^2\tilde{x} = (\tilde{Q}^2 + \tilde{M}^2)\tilde{x} \quad \forall \tilde{x} \in \mathcal{D}(\tilde{A}^2) = \mathcal{D}(\tilde{Q}^2)$.

Beweis. \tilde{A} ist selbstadjungiert nach Voraussetzung (2.16), daher ist $\tilde{A}^*\tilde{A} = \tilde{A}^2$ dicht definiert und selbstadjungiert. \tilde{M} ist stetig nach Voraussetzung (2.19). Für alle $\tilde{x} \in \mathcal{D}(\tilde{A}^2) = \mathcal{D}(\tilde{Q}^2) \subset \mathcal{D}(\tilde{Q})$ gilt

$$\begin{aligned}\tilde{A}^2\tilde{x} &= (\tilde{Q} + \tilde{M}\tilde{J})(\tilde{Q} + \tilde{M}\tilde{J})\tilde{x} \\ &= (\tilde{Q}^2 + \tilde{M}\tilde{J}\tilde{Q} + \tilde{Q}\tilde{M}\tilde{J} + \tilde{M}\tilde{J}\tilde{M}\tilde{J})\tilde{x} \\ &= (\tilde{Q}^2 - \tilde{M}\tilde{Q}\tilde{J} + \tilde{M}\tilde{Q}\tilde{J} + \tilde{M}\tilde{M}\tilde{J}\tilde{J})\tilde{x} \\ &= (\tilde{Q}^2 + \tilde{M}^2)\tilde{x}\end{aligned}$$

□

Es folgt die Matrixdarstellung

$$\tilde{A}^2 = \tilde{Q}^2 + \tilde{M}^2 = \begin{pmatrix} 0 & B \\ B^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & B \\ B^* & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} BB^* + A^2 & 0 \\ 0 & B^*B + D^2 \end{pmatrix}.$$

Behauptung 2.16. \tilde{A}^2 ist strikt positiv: $(\tilde{A}^2 \tilde{x}, \tilde{x}) \geq \frac{1}{\|\tilde{M}^{-1}\|^2} \quad \forall \tilde{x} \in \mathcal{D}(\tilde{A}^2)$ mit $\|\tilde{x}\| = 1$

Beweis. $(\tilde{A}^2 \tilde{x}, \tilde{x}) \geq (\tilde{M}^2 \tilde{x}, \tilde{x}) + (\tilde{Q}^2 \tilde{x}, \tilde{x}) \geq (\tilde{M}^2 \tilde{x}, \tilde{x}) = \|\tilde{M} \tilde{x}\|^2$

$$= \frac{\|\tilde{M}^{-1}\|^2 \|\tilde{M} \tilde{x}\|^2}{\|\tilde{M}^{-1}\|^2} \geq \frac{\|\tilde{M}^{-1} \tilde{M} \tilde{x}\|^2}{\|\tilde{M}^{-1}\|^2} = \frac{\|\tilde{x}\|^2}{\|\tilde{M}^{-1}\|^2} = \frac{1}{\|\tilde{M}^{-1}\|^2}$$

□

2.5 Polardarstellung des ungeraden Anteils

Wie jeder abgeschlossene Operator besitzt \tilde{Q} eine Polarzerlegung in ein Produkt einer partiellen Isometrie, genannt $\text{sgn } \tilde{Q}$, mit einem nichtnegativen selbstadjungierten Operator, genannt $|\tilde{Q}|$:

$$\tilde{Q} = (\text{sgn } \tilde{Q})|\tilde{Q}|$$

In der Matrixdarstellung haben wir

$$\text{sgn } \tilde{Q} = \begin{pmatrix} 0 & S \\ S^* & 0 \end{pmatrix} \text{ mit}$$

$S =$ stetige Fortsetzung von $B(B^*B)^{-1/2} =$ stetige Fortsetzung von $(BB^*)^{-1/2}B$ und

$S^* =$ stetige Fortsetzung von $(B^*B)^{-1/2}B^* =$ stetige Fortsetzung von $B^*(BB^*)^{-1/2}$,

sowie $S = S^* = 0$ auf $\ker \tilde{Q}$.

Weil \tilde{Q} selbstadjungiert vorausgesetzt wird, kann $\text{sgn } \tilde{Q}$ mit Hilfe des Funktionalkalküls und der Spektralschar von \tilde{Q} definiert werden und ist ebenfalls selbstadjungiert. Weiters folgt

$$(\text{sgn } \tilde{Q})^2 = 1 \quad \text{auf } (\ker \tilde{Q})^\perp.$$

Klarerweise kommutieren die Operatoren \tilde{Q} , $(\text{sgn } \tilde{Q})$ und $|\tilde{Q}|$.

Zusammen mit den Behauptungen 2.15 und 2.16 folgen die **Vertauschungsregeln**:

\tilde{Q} sowie \tilde{M} kommutieren mit $\tilde{A}^2 = \tilde{Q}^2 + \tilde{M}^2$ auf ganz $\mathcal{D}(\tilde{A}^2)$.

$\Rightarrow \tilde{Q}$ und $|\tilde{A}|$ kommutieren

$\Rightarrow \tilde{Q}$ und $|\tilde{A}|^{-1}$ kommutieren

$\Rightarrow \text{sgn } \tilde{Q}$ und $|\tilde{A}|^{-1}$ kommutieren

\tilde{M} und \tilde{A}^2 kommutieren $\Rightarrow \tilde{M}$ und $|\tilde{A}|$ kommutieren

$\Rightarrow \tilde{M}$ und $|\tilde{A}|^{-1}$ kommutieren

(2.21)

(usw.)

2.6 Die abstrakte Foldy-Wouthuysen-Transformation

Jetzt rechnen wir die Foldy-Wouthuysen-Transformation nochmals mit den neuen Bezeichnungen nach, wobei wir nun die Lücken in der Ableitung von Kapitel 2.1 schließen und genauer auf Definitionsbereiche achten wollen.

Satz 2.17. Sei $\tilde{A} = \tilde{Q} + \tilde{M}\tilde{J}$ ein supersymmetrischer Dirac-Operator. Wir definieren

$$\tilde{U}_{\text{FW}} := \tilde{a}_+ + \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{a}_-, \quad \tilde{a}_\pm := \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{1 \pm \tilde{M}|\tilde{A}|^{-1}}.$$

\tilde{U}_{FW} ist unitär und es gilt

$$\tilde{U}_{\text{FW}}\tilde{A}\tilde{U}_{\text{FW}}^* = \tilde{J}|\tilde{A}| = \tilde{J}\sqrt{\tilde{Q}^2 + \tilde{M}^2} =: \tilde{A}_{\text{FW}}$$

bzw. in der Matrixdarstellung

$$\begin{aligned} \tilde{a}_\pm &:= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 \pm A(BB^* + A^2)^{-1/2}} & 0 \\ 0 & \sqrt{1 \pm D(B^*B + D^2)^{-1/2}} \end{pmatrix}, \\ \tilde{U}_{\text{FW}} &:= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 + A(BB^* + A^2)^{-1/2}} & 0 \\ 0 & \sqrt{1 + D(B^*B + D^2)^{-1/2}} \end{pmatrix} + \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & S \\ S^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - A(BB^* + A^2)^{-1/2}} & 0 \\ 0 & \sqrt{1 - D(B^*B + D^2)^{-1/2}} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 + A(BB^* + A^2)^{-1/2}} & S^*\sqrt{1 - D(B^*B + D^2)^{-1/2}} \\ -S\sqrt{1 - A(BB^* + A^2)^{-1/2}} & \sqrt{1 + D(B^*B + D^2)^{-1/2}} \end{pmatrix}, \\ \tilde{U}_{\text{FW}} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & -D \end{pmatrix} \tilde{U}_{\text{FW}}^* &= \begin{pmatrix} \sqrt{BB^* + A^2} & 0 \\ 0 & -\sqrt{B^*B + D^2} \end{pmatrix} = \tilde{A}_{\text{FW}} \end{aligned} \tag{2.22}$$

Beweis. Es gilt folgende Implikationskette: \tilde{A} selbstadjungiert $\Rightarrow |\tilde{A}|$ selbstadjungiert $\Rightarrow |\tilde{A}|^{-1}$ selbstadjungiert (wenn \tilde{A} nicht injektiv ist, betrachten wir für das Bilden der Inversen die Einschränkung von \tilde{A} auf $(\ker \tilde{A})^\perp \cap \mathcal{D}(\tilde{A})$). \tilde{M} ist stetig und selbstadjungiert laut Voraussetzung (2.19) und vertauscht mit $|\tilde{A}|^{-1}$ laut (2.21). Daraus folgt:

$$(\tilde{M}|\tilde{A}|^{-1})^* = |\tilde{A}|^{-1}\tilde{M} = \tilde{M}|\tilde{A}|^{-1}.$$

Daraus folgt: $1 \pm \tilde{M}|\tilde{A}|^{-1}$ ist selbstadjungiert. Folgende Rechnung zeigt, dass $\tilde{M}|\tilde{A}|^{-1}$ beschränkt ist und eingeschränkt auf $|\tilde{A}|((\ker \tilde{Q})^\perp \cap \mathcal{D}(\tilde{Q}))$ Norm < 1 hat:

$$\begin{aligned} \|\tilde{M}|\tilde{A}|^{-1}\tilde{x}\| &= \|\tilde{M}(\tilde{Q}^2 + \tilde{M}^2)^{-1/2}\tilde{x}\| < \|\tilde{x}\|^2 \\ \Leftrightarrow & \|\tilde{M}\tilde{y}\| < \|(\tilde{Q}^2 + \tilde{M}^2)^{1/2}\tilde{y}\| \\ \Leftrightarrow & \|\tilde{M}\tilde{y}\| < (\tilde{Q}^2 + \tilde{M}^2)\tilde{y}, \tilde{y} \\ \Leftrightarrow & \|\tilde{M}\tilde{y}\| < \|\tilde{Q}\tilde{y}\| + \|\tilde{M}\tilde{y}\| \\ \Leftrightarrow & 0 < \|\tilde{Q}\tilde{y}\| \quad \forall \tilde{y} \in (\ker \tilde{Q})^\perp \cap \mathcal{D}(\tilde{Q}) \end{aligned}$$

Daraus folgt: $1 \pm \tilde{M}|\tilde{A}|^{-1}$ ist positiv auf $|\tilde{A}|((\ker \tilde{Q})^\perp \cap \mathcal{D}(\tilde{Q}))$. Der Operator $\tilde{M}|\tilde{A}|^{-1}$ ist stetig und daher eindeutig auf den Abschluss von $|\tilde{A}|(\ker \tilde{Q})^\perp$ stetig fortsetzbar; auf dem Komplement davon (insbesondere auf $|\tilde{A}|(\ker \tilde{Q})$) setzen wir ihn gleich 1. Daraus folgt, dass \tilde{a}_+ und \tilde{a}_- wohldefiniert und selbstadjungiert sind. Weiter folgt:

$$\tilde{U}_{\text{FW}}^* = (\tilde{a}_+ + \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{a}_-)^* = \tilde{a}_+ + \tilde{a}_-(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{J} = \tilde{a}_+ - \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{a}_-$$

\tilde{a}_+ und \tilde{a}_- kommutieren, weil \tilde{M} und $|\tilde{A}|^{-1}$ kommutieren. \tilde{a}_+ und \tilde{a}_- kommutieren mit \tilde{M} , $|\tilde{A}|^{-1}$ und mit \tilde{Q} , denn \tilde{Q} kommutiert mit \tilde{M} und $|\tilde{A}|^{-1}$. Folglich kommutiert auch $\text{sgn } \tilde{Q}$ mit \tilde{a}_+ und \tilde{a}_- . Als Hauptdiagonal-Operator-Matrizen kommutieren \tilde{a}_+ und \tilde{a}_- mit \tilde{J} . Wenn wir uns alle Vertauschungsregeln überlegt haben, ist das Schwierigste getan, denn der Nachweis, dass \tilde{U}_{FW} unitär ist, ist jetzt eine leichte Rechnung, weil alle auftretenden Operatoren überall definiert sind:

$$\begin{aligned} \tilde{U}_{\text{FW}}\tilde{U}_{\text{FW}}^* &= (\tilde{a}_+ + \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{a}_-)(\tilde{a}_+ - \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{a}_-) \\ &= \tilde{a}_+^2 + \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{a}_-\tilde{a}_+ - \tilde{a}_+\tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{a}_- - \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{a}_-\tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{a}_- \\ &= \tilde{a}_+^2 + \tilde{a}_-^2 \\ &= \frac{1}{2}(1 + \tilde{M}|\tilde{A}|^{-1}) + \frac{1}{2}(1 - \tilde{M}|\tilde{A}|^{-1}) \\ &= 1. \end{aligned}$$

\tilde{A} antikommutiert mit $\tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})$:

$$\begin{aligned} (\tilde{Q} + \tilde{M}\tilde{J})\tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q}) &= \tilde{Q}\tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q}) + \tilde{M}(\text{sgn } \tilde{Q}), \\ \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})(\tilde{Q} + \tilde{M}\tilde{J}) &= \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{Q} + \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{M}\tilde{J} = -\tilde{Q}\tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q}) - \tilde{M}(\text{sgn } \tilde{Q}); \end{aligned}$$

das letzte Gleichheitszeichen gilt wegen (2.15) zusammen mit der Injektivität von \tilde{J} . Die Operatoren \tilde{a}_+ und \tilde{a}_- kommutieren mit \tilde{M} , \tilde{Q} und \tilde{J} , also auch mit \tilde{A} , d. h.: wo $\tilde{a}_+\tilde{A}$ und $\tilde{A}\tilde{a}_+$ beide definiert sind, sind sie gleich. Nun versucht man unter Beachtung der Vertauschungsregeln auf direktem Wege nachzurechnen, wobei man, wo notwendig, die stetige Fortsetzung bildet, damit man den Definitionsbereich nicht verkleinern muss:

$$\begin{aligned} \tilde{U}_{\text{FW}}\tilde{A}\tilde{U}_{\text{FW}}^*\tilde{x} &= (\tilde{a}_+ + \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{a}_-)\tilde{A}(\tilde{a}_+ - \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{a}_-)\tilde{x} \quad \forall \tilde{x} \in \tilde{U}_{\text{FW}}\mathcal{D}(\tilde{A}) \\ &= (\tilde{a}_+ + \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{a}_-)(\tilde{a}_+ + \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{a}_-)\tilde{A}\tilde{x} \quad \forall \tilde{x} \in \mathcal{D}(\tilde{A}) \cap \tilde{U}_{\text{FW}}\mathcal{D}(\tilde{A}) \\ &= (\tilde{a}_+^2 + \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{a}_-\tilde{a}_+ + \tilde{a}_+\tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{a}_- + \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{a}_-\tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\tilde{a}_-)\tilde{A}\tilde{x} \\ &= \left(\frac{1}{2}(1 + \tilde{M}|\tilde{A}|^{-1}) + 2\tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\frac{1}{2}\sqrt{1 - \tilde{M}|\tilde{A}|^{-1}}\sqrt{1 + \tilde{M}|\tilde{A}|^{-1}} - \frac{1}{2}(1 - \tilde{M}|\tilde{A}|^{-1})\right)\tilde{A}\tilde{x} \\ &= (\tilde{M}|\tilde{A}|^{-1} + \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\sqrt{1 - \tilde{M}^2|\tilde{A}|^{-2}})\tilde{A}\tilde{x} \\ &= (\tilde{M}|\tilde{A}|^{-1} + \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\sqrt{((\tilde{M}^2 + \tilde{Q}^2) - \tilde{M}^2)(\tilde{M}^2 - \tilde{Q}^2)^{-1}})\tilde{A}\tilde{x} \\ &= (\tilde{M}|\tilde{A}|^{-1} + \tilde{J}(\text{sgn } \tilde{Q})\sqrt{\tilde{Q}^2\tilde{A}^{-2}})\tilde{A}\tilde{x} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= (\tilde{M}\tilde{A}\tilde{\Gamma}^{-1} + \tilde{J}(\operatorname{sgn} \tilde{Q})|\tilde{Q}|\tilde{A}\tilde{\Gamma}^{-1})\tilde{A}\tilde{x} \\
&= (\tilde{M} + \tilde{J}\tilde{Q})\tilde{A}\tilde{\Gamma}^{-1}\tilde{A}\tilde{x} \\
&= \tilde{J}(\tilde{M}\tilde{J} + \tilde{Q})\tilde{A}\tilde{\Gamma}^{-1}\tilde{A}\tilde{x} \\
&= \tilde{J}\tilde{A}\tilde{A}\tilde{\Gamma}^{-1}\tilde{A}\tilde{x} \\
&= \tilde{J}\tilde{A}\tilde{x} \quad \forall \tilde{x} \in \mathcal{D}(\tilde{A}) \cap \tilde{U}_{\text{FW}}\mathcal{D}(\tilde{A})
\end{aligned}$$

Mit diesem Beweis folgt die Behauptung $\tilde{U}_{\text{FW}}\tilde{A}\tilde{U}_{\text{FW}}^*\tilde{x} = \tilde{J}\tilde{A}\tilde{x}$ nur für alle $\tilde{x} \in \mathcal{D}(\tilde{A}) \cap \tilde{U}_{\text{FW}}\mathcal{D}(\tilde{A})$; dem Durchschnitt der Definitionsbereiche beider Seiten, d. h. es wäre noch $\tilde{U}_{\text{FW}}\mathcal{D}(\tilde{A}) \supset \mathcal{D}(\tilde{A})$ zu zeigen. Hierfür ist mir keine Möglichkeit eingefallen. \square

2.7 Darstellungen mit Winkeloperatoren

2.7.1. Wenden wir uns jetzt der allgemeinen Theorie der 2×2 -Block-Operator-Matrizen zu. [LT] beweisen folgenden

Satz 2.18. *Sei \tilde{A} eine selbstadjungierte, injektive Operator-Matrix (2.14) im Hilbertraum $\tilde{\mathcal{H}}$. Die Operatoren A und D seien nichtnegativ. Bezeichnet $\tilde{\mathcal{L}}_+$ bzw. $\tilde{\mathcal{L}}_-$ den Spektralraum von \tilde{A} gehörig zum Intervall $(-\infty, 0)$ bzw. $[0, +\infty)$, dann gilt die Darstellung*

$$\tilde{\mathcal{L}}_+ = \left\{ \begin{pmatrix} x \\ Kx \end{pmatrix} : x \in \mathcal{H} \right\}, \quad \tilde{\mathcal{L}}_- = \left\{ \begin{pmatrix} -K^*\hat{x} \\ \hat{x} \end{pmatrix} : \hat{x} \in \hat{\mathcal{H}} \right\}$$

mit einer Kontraktion K von \mathcal{H} in $\hat{\mathcal{H}}$.

Beweis. Siehe [LT], Theorem 3.1. \square

Wir zeichnen einige wichtige Etappen nach, die am Ende zu einer Diagonalisierung der Operator-Matrix (2.17) führen. Für allgemeinere und detailliertere Ergebnisse verweise ich auf [LT]. Am Beginn führen wir eine Beziehung an, die auf dem Gebiet der Operatoretheorie arbeitenden Mathematikern wohlbekannt ist, während zumindest den Physikern, die ich dazu befragte, sie noch nicht untergekommen war und in der physikalischen Literatur, die ich heranzog, sie nicht zu finden war. Es handelt sich um eine Relation zwischen einem Integral in der Resolventenmenge von \tilde{A} und den orthogonalen Projektionen \tilde{P}_+ bzw. \tilde{P}_- auf den Spektralraum $\tilde{\mathcal{L}}_+$ bzw. $\tilde{\mathcal{L}}_-$:

$$\frac{1}{\pi i} \int_{i\mathbb{R}} (\tilde{A} - z)^{-1} dz = \tilde{P}_+ - \tilde{P}_-, \quad (\text{Integrationsrichtung von } -i\infty \text{ nach } +i\infty)$$

wobei der Strich beim Integralzeichen bedeuten soll, dass bei $z = \infty$ eventuell der Cauchy'sche Hauptwert zu nehmen ist. Weiters lässt sich zeigen ([LT], Theorem 1.1), dass $\tilde{P}_+ + \tilde{P}_- = 1$ ist. Daraus folgen die Darstellungen für die Projektionen

$$\tilde{P}_+ = \frac{1}{2}I + \frac{1}{2\pi i} \int_{i\mathbb{R}}' (\tilde{A} - z)^{-1} dz ,$$

$$\tilde{P}_- = -\frac{1}{2}I + \frac{1}{2\pi i} \int_{i\mathbb{R}}' (\tilde{A} - z)^{-1} dz .$$

Mit Hilfe der Fundamentalprojektionen

$$\tilde{Q}_+ : \tilde{\mathcal{H}} \rightarrow \mathcal{H}, \begin{pmatrix} x \\ \hat{x} \end{pmatrix} \mapsto x$$

$$\tilde{Q}_- : \tilde{\mathcal{H}} \rightarrow \hat{\mathcal{H}}, \begin{pmatrix} x \\ \hat{x} \end{pmatrix} \mapsto \hat{x}$$

lässt sich der Winkeloperator K des Unterraums $\tilde{\mathcal{L}}_+$ bzgl. \mathcal{H} angeben:

$$K = \tilde{Q}_- (\tilde{Q}_+ | \tilde{\mathcal{L}}_+)^{-1}$$

K existiert, falls $\tilde{Q}_+ | \tilde{\mathcal{L}}_+$ umkehrbar ist und ist dann eine eindeutig bestimmte Kontraktion von \mathcal{H} in $\hat{\mathcal{H}}$. (Mehr zur Theorie der Winkeloperatoren in [Bo], S. 54f.) Mit Hilfe von K lassen sich die Elemente von $\tilde{\mathcal{L}}_+$ angeben, so wie es Satz 2.18 aussagt.

Folgerung 2.19. K erfüllt die Riccati-Gleichung

$$(KBK + KA - DK - B^*)x = 0 \quad \forall x \in \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B^*) \text{ mit } Kx \in \mathcal{D}(B) \cap \mathcal{D}(D). \quad (2.23)$$

Beweisskizze. Die Riccati-Gleichung sagt nichts anderes aus, als dass der Raum

$$\tilde{\mathcal{L}}_+ = \left\{ \begin{pmatrix} x \\ Kx \end{pmatrix} : x \in \mathcal{H} \right\}$$

invariant unter \tilde{A} ist. Letzteres bedeutet, dass sich der Bildvektor

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ Kx \end{pmatrix}$$

wieder in der Form

$$\begin{pmatrix} y \\ Ky \end{pmatrix}$$

schreiben lässt, d. h.

$$(B^* + DK)x = K(A + BK)x \quad \forall x \in \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B^*) \text{ mit } Kx \in \mathcal{D}(B) \cap \mathcal{D}(D). \quad (2.24)$$

□

Mit (2.24) rechnet man leicht nach, dass folgende Diagonalisierung gilt:

$$\begin{pmatrix} I & -K^* \\ K & I \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & -K^* \\ K & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A + BK & 0 \\ 0 & D - B^*K^* \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

Sie lässt sich nur für den Fall beweisen, dass K eine gleichmäßige Kontraktion ist ([LT], Corollary 3.2). Die Transformationsmatrizen sind i. A. nicht unitär. Es lassen sich jedoch auch unitäre finden: Mit $\Gamma := (I + K^*K)^{-1/2}$ und $\Delta := (I + KK^*)^{-1/2}$ haben wir

$$\begin{pmatrix} \Gamma & -K^*\Delta \\ K\Gamma & \Delta \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma & -K^*\Delta \\ K\Gamma & \Delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Gamma^{-1}(A+BK)\Gamma & 0 \\ 0 & \Delta^{-1}(D-B^*K^*)\Delta \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

Wie man auf die Transformationsmatrizen plausibel kommt, konnte ich nicht herausfinden. Laut Professor Langer handelt es sich um eine kleine Tüftelei, die aber für einen erfahrenen Funktionalanalytiker kein großes Problem darstellt.

2.7.2. Für einen supersymmetrischen Dirac-Operator kann man den Winkeloperator K sogar explizit angeben (wie man darauf kommt, ist wieder schwer zu sagen):

$$K = B^* (A + (A^2 + BB^*)^{1/2})^{-1} \quad (2.27)$$

Bemerkung 2.20. Wir können B injektiv voraussetzen (siehe [LT], Section 3.2).

Lemma 2.21. *Der Operator K hat die Eigenschaften*

$$\mathcal{D}(K) = \mathcal{H}, \quad K\mathcal{D}(B^*) \subset \mathcal{D}(B), \quad \|Kx\| < \|x\| \quad \forall x \neq 0, x \in \mathcal{H}$$

Der *Beweis* kann mit Hilfe der Theorie der quadratischen Formen geführt werden (siehe [LT], Lemma 3.6).

Nun ist noch zu zeigen, dass K der Winkeloperator von $\tilde{\mathcal{L}}_+$ bzgl. \mathcal{H} ist. Die Beweisidee dafür ist die folgende: Man zeigt, dass der Raum

$$\left\{ \begin{pmatrix} x \\ Kx \end{pmatrix} : x \in \mathcal{H} \right\} \quad (2.28)$$

invariant unter \tilde{A} ist, indem man für K die Riccati-Gleichung (2.23) nachweist. Dann rechnet man geschickt nach, dass die Einschränkung von \tilde{A} auf (2.28) nichtnegativ ist. Aufgrund der analogen Gestalt von K und $K^* = (A + (A^2 + BB^*)^{1/2})^{-1} B = B(-D + (D^2 + B^*B)^{1/2})^{-1}$ erhält man daraufhin unmittelbar, dass auch der zu (2.28) orthogonal komplementäre Raum

$$\left\{ \begin{pmatrix} -K^*\hat{x} \\ \hat{x} \end{pmatrix} : \hat{x} \in \hat{\mathcal{H}} \right\} \quad (2.29)$$

invariant unter \tilde{A} ist und dass die Einschränkung von \tilde{A} auf (2.28) nichtpositiv ist. Dann müssen (2.28) bzw. (2.29) die Spektralräume $\tilde{\mathcal{L}}_+$ bzw. $\tilde{\mathcal{L}}_-$ von \tilde{A} sein ([LT], an Lemma 3.6 anschließend).

Wir erhalten die nichtunitäre Diagonalisierung des Dirac-Operators \tilde{A} mit Supersymmetrie

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} I & -K^* \\ K & I \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & -D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & -K^* \\ K & I \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} A + BB^*(A + (A^2 + BB^*)^{1/2})^{-1} & 0 \\ 0 & -D - B^*B(D + (D^2 + B^*B)^{1/2})^{-1} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.30)$$

Im Vergleich zum Ergebnis (2.22) der Foldy-Wouthuysen-Transformation erscheint (2.30) komplizierter, obwohl noch gar nicht die unitäre Transformation der Bauart (2.26) verwendet wurde.

3. Sukzessive Foldy-Wouthuysen-Transformation (für ein Teilchen in einem Feld)

Wir verwenden zunächst wieder die von den Physikern verwendeten Benennungen.

3.1 Die Dirac-Gleichung für ein Teilchen in einem Feld

Der Einfachheit halber betrachten wir in dieser Arbeit nur statische äußere Felder (die also für alle Zeit unveränderlich bleiben). Die Störung des Feldes durch das Teilchen, das sich im Feld befindet, wollen wir vollkommen vernachlässigen (das ist mit *äußeres* Feld gemeint). Im Vergleich zu anderen Effekten, die die Dirac-Gleichung unberücksichtigt lässt, fällt dieser Fehler nicht ins Gewicht. Das Feld selbst dürfte korrekter Weise nicht als n -Tupel von Werten, die jedem Raumzeit-Punkt zugeordnet sind, beschrieben werden (so wie es in der Dirac-Theorie gemacht wird), sondern es wäre zu quantisieren (das geschieht in der Quantenfeldtheorie). Außer Acht bleiben in der Dirac-Gleichung z. B. auch Effekte aus der Interaktion von Licht mit Materie. Die Dirac-Gleichung gilt daher selbst wieder nur näherungsweise. (Physikalische Modelle sind auf die eine oder andere Weise stets „nur“ Näherungen.) Der Physiker zieht sie heran, um zu sehen, wie weit man mit ihr kommt und ist sich ihrer Grenzen bewusst. Er betrachtet sie als erste Stufe zum Verständnis exakterer Theorien, welche einen erheblich komplizierteren Formalismus erfordern (vgl. [T], S. VI).

Wir diskutieren hier nur ein äußeres *elektromagnetisches* Feld. Das ist der wichtigste Anwendungsfall der Dirac-Gleichung ([V], S. 163). Wie gesagt wollen wir weiters das elektromagnetische Feld als statisch voraussetzen. Wir geben es in der Form eines Skalarpotentials $\varphi(\mathbf{r})$ und Vektorpotentials $A(\mathbf{r})$ an. Damit schreibt sich der Dirac-Operator für ein Elektron im äußeren elektromagnetischen Feld:

$$H = \beta m + \mathcal{Q} + \mathcal{E} \tag{3.1}$$

$$\mathcal{Q} = \alpha \cdot (p - eA), \quad \mathcal{E} = e\varphi \quad (e = \text{Ladung des Elektrons})$$

\mathcal{E} ist in der Standard-Darstellung (1.6) der Dirac-Matrizen ein Multiplikationsoperator:

$$\mathcal{E} : \psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \\ \psi_3(\mathbf{r}) \\ \psi_4(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} \varphi(\mathbf{r}) \psi_1(\mathbf{r}) \\ \varphi(\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r}) \\ \varphi(\mathbf{r}) \psi_3(\mathbf{r}) \\ \varphi(\mathbf{r}) \psi_4(\mathbf{r}) \end{pmatrix},$$

\mathcal{Q} ist unbeschränkt und abgeschlossen. Keiner der Operatoren ist explizit zeitabhängig. Unter geeigneten Regularitätsforderungen an das Potential φ (vgl. [T], Chapter 4.3) ist der Dirac-Operator (3.1) selbstadjungiert auf dem gleichen Definitionsbereich wie der freie Dirac-Operator, nämlich $H^1(\mathbb{R}^3)$.

Bemerkung 3.1 (Maßfreiheit). Das Vektorpotential $A(\mathbf{r})$ und das Skalarpotential $\varphi(\mathbf{r})$ sind nicht eindeutig bestimmt. Es ändert sich nichts an den physikalischen Voraussagen, wenn man folgende so gen. Eichtransformation durchführt:

$$\begin{aligned}
A'(\mathbf{r}) &:= A(\mathbf{r}) - \nabla \mathcal{A}(\mathbf{r}) && (\mathcal{A} = \text{beliebige differenzierbare Funktion}) \\
\rho'(\mathbf{r}) &:= \rho(\mathbf{r}) + k && (k = \text{beliebige Konstante})
\end{aligned}
\tag{3.2}$$

Die Lösungen des Dirac-Operators vor und nach einer Eichtransformation (3.2) unterscheiden sich um eine Konstante vom Betrag 1. Diese Konstante bewirkt weder eine Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte noch anderer physikalischer Observablen – genauso wie es sein sollte, wenn die Dirac-Gleichung physikalisch sinnvoll ist (vgl. [St], S. 128; [T], S. 119f.).

Die Lösungen der Dirac-Gleichung mit (3.1) lassen sich jetzt nicht mehr eindeutig danach klassifizieren, ob sie zu positiver oder negativer Energie gehören, denn das Feld kann Übergänge zwischen Zuständen positiver und negativer Energie herbeiführen. Der Dirac-Operator (3.1) kommutiert nicht mit dem Signum von H des freien Dirac-Operators (1.8) ([T], S. 120). Andererseits weiß man, dass der Dirac-Operator (3.1) ein vollständiges System von Eigenfunktionen besitzt, wenn das Feld hinreichend schwach ist. Es existiert dann eine scharfe Grenze zwischen den Lösungen zu positiver und jenen zu negativer Energie. Außerdem bleibt für schwache Felder das Vorzeichen der Energie näherungsweise (für stationäre Lösungen sogar exakt) erhalten (vgl. [FW], S. 33f.).

Für starke Felder gilt das eben Gesagte nicht mehr. Beim Versuch, eine analoge Vorstellung aufrecht zu erhalten, ergibt sich das berühmte **Klein'sche Paradoxon**: Es lässt sich am einfachsten demonstrieren, wenn man von nur einer Raumkoordinate ausgeht. Eine Welle $\psi(x)$ soll von links ($x = -\infty$) einlaufen, das Potential steigt bei $x = 0$ um ΔV und ist sonst für alle x konstant. Man berechnet nun, wie eine Wellenfunktion, die die Dirac-Gleichung löst, im Bereich $x \geq 0$ aussieht. Aus den Erfahrungen mit der nichtrelativistischen Quantentheorie würde man erwarten, dass bei Erhöhung der Potentialbarriere ΔV der Anteil der reflektierten Welle immer größer wird. In der Dirac-Theorie gilt dies nur für kleine Sprünge ΔV . Wird ΔV vergleichbar mit der Energie E , dann wird die Wahrscheinlichkeitsdichte rechts Null (Totalreflexion) und schließlich negativ; dafür scheint ein immer größer werdender Anteil die Potentialbarriere zu überwinden. Ist der Potentialsprung ΔV so groß, dass er sogar $E + mc^2$ (= die Summe aller Energien außer ΔV , die im System vorkommen) übersteigt, berechnet man eine Lösung, die durch die Barriere hindurch geht ([St], S. 85ff., S. 130). Das Klein'sche Paradoxon lässt sich nur lösen, wenn man annimmt, dass am Ort des Potentialsprungs Teilchen-/Antiteilchen-Paare erzeugt werden. (Damit verwirft man die Ein-Teilchen-Interpretation der Dirac-Theorie. Die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(\mathbf{r})|^2$ wird zu einer Ladungsdichte.)

Weil die Zustände zu positiver und negativer Energie miteinander interferieren, erscheint es unwahrscheinlich, dass man die Dirac-Gleichung für ein Teilchen im Feld so entkoppeln kann wie im Fall des freien Teilchens, d. h. eine Diagonalisierung der (3.1) entsprechenden Operator-Matrix erscheint schwer möglich. Wenn man eine finden kann, dann hätten die invarianten Teilräume wohl kaum eine ähnlich einfache physikalische Interpretation wie im Fall des freien Teilchens.

Bemerkung 3.2. Die Wellenfunktion ψ eines Teilchens, das in einem Teilbereich V des Raums lokalisiert ist, d. h.

$$\int_V |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1,$$

besteht stets aus Anteilen zu positiver und negativer Energie ([T], S. 31).

3.2 Herleitung der sukzessiven Foldy-Wouthuysen-Transformation

3.2.1. Die Foldy-Wouthuysen-Transformation für ein Teilchen im Feld, die wir jetzt konstruieren wollen, gilt nur für Problemstellungen, d. h. Vektoren $\psi \in \mathcal{D}(H)$ und Felder φ, A , mit den qualitativen Eigenschaften

$$\|(\sqrt{p^2 + m^2} - m)\psi\| \ll m\|\psi\|, \quad (3.3a)$$

$$\| |p| \psi \| \ll m\|\psi\|, \quad (3.3b)$$

$$e\varphi(\mathbf{r}), \|eA(\mathbf{r})\| \ll m \quad \forall \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \quad (3.3c)$$

(vgl. [M], S. 406ff.). Wie sich später herausstellt, dürfen die Potentiale auch nicht schnell schwanken (siehe Kapitel 3.6).

3.2.2. Der wesentlichste Grundgedanke der Foldy-Wouthuysen-Transformation für ein Teilchen in einem Feld ist, den folgenden Entwicklungssatz zur Konstruktion einer geeigneten Transformation zu benutzen.

Entwicklungssatz 3.3. Ein Operatorenprodukt der Gestalt $e^{iS}He^{-iS}$ lässt sich formal in eine Reihe von Mehrfachkommutatoren entwickeln:

$$e^{iS}He^{-iS} = H + i[S, H] + \frac{i^2}{2!} [S, [S, H]] + \cdots + \frac{i^n}{n!} \underbrace{[S, [S, \cdots, [S, H] \cdots]]}_{n \text{ Kommutatoren}} + \cdots \quad (3.4)$$

Beweis. Wir zeigen die Behauptung für das allgemeinere Produkt

$$F(\lambda) := e^{i\lambda S} H e^{-i\lambda S} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \left(\frac{\partial^n F}{\partial \lambda^n} \right)_{\lambda=0}. \quad (3.5)$$

Die Entwicklung gilt zumindest formal (d. h. ohne Rücksicht auf die Definitionsbereiche). Wir berechnen jetzt die erste Ableitung

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda} = e^{i\lambda S} iS H e^{-i\lambda S} - e^{i\lambda S} H e^{-i\lambda S} iS = e^{i\lambda S} i[S, H] e^{-i\lambda S}.$$

Durch Induktion nach n erhalten wir

$$\frac{\partial^n F}{\partial \lambda^n} = \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(e^{i\lambda S} \underbrace{i^{n-1} [S, [S, \cdots, [S, H] \cdots]]}_{n-1 \text{ Kommutatoren}} e^{-i\lambda S} \right) = e^{i\lambda S} \underbrace{i^n [S, [S, \cdots, [S, H] \cdots]]}_{n \text{ Kommutatoren}} e^{-i\lambda S}.$$

Die zu zeigende Entwicklung (3.4) folgt nun aus (3.5) für $\lambda := 1$. □

In unserem Fall ist jetzt

$$H = \beta m + \mathcal{E} + \mathcal{Q}$$

$$\mathcal{Q} = \alpha \cdot \pi = \alpha \cdot (p - eA), \quad \mathcal{E} = e\varphi$$

und indem man den Operator S geeignet wählt, soll die Transformation

$$e^{iS} H e^{-iS}$$

den Dirac-Operator H möglichst frei von ungeraden Operatoren machen. Wie gesagt ist es nicht möglich, die ungeraden Operatoren ganz verschwinden zu lassen. Man kann nur versuchen, die ungeraden Operatoren (d. h. die Komponenten der Nebendiagonale in 2×2 -Matrixdarstellung) „kleiner“ zu machen, zumindest im nichtrelativistischen Grenzfall unter den Bedingungen (3.3), d. h. nur für „gewisse“ Vektoren in $\mathcal{D}(H)$ wird der verbleibende ungerade Anteil geringer.

Der erste Kommutator der Entwicklung (3.4) ist

$$i[S, H] = i[S, \beta m] + i[S, \mathcal{E}] + i[S, \mathcal{Q}]. \quad (3.6)$$

\mathcal{Q} muss auf jeden Fall wegfallen; das können wir erreichen, wenn wir

$$S := -i \frac{\beta \mathcal{Q}}{2m} \quad (3.7)$$

setzen, denn damit haben wir S so gewählt, dass der erste Term in (3.6)

$$i[S, \beta m] = i[-i \frac{\beta \mathcal{Q}}{2m}, \beta m] = \frac{1}{2} [\beta \mathcal{Q}, \beta] = -\mathcal{Q}$$

wird und das \mathcal{Q} von H weghebt. Der nächste Term in (3.6)

$$i[S, \mathcal{E}] = i[-i \frac{\beta \mathcal{Q}}{2m}, \mathcal{E}] = \frac{\beta}{2m} [\mathcal{Q}, \mathcal{E}]$$

ist ungerade und erzeugt somit einen neuen ungeraden Anteil im transformierten Operator. Dieser Anteil enthält jetzt aber den Faktor $1/m$. Laut Annahme gilt $\|m\psi\| \gg \|\mathcal{Q}\psi\|$ für alle Vektoren (Wellenfunktionen) ψ , die die Bedingungen (3.3) für eine nichtrelativistische Näherung erfüllen. Wir wollen jetzt voraussetzen:

$$\mathcal{Q} \text{ und } \mathcal{E} \text{ sind unabhängig von } m. \quad (3.8)$$

Das bedeutet, dass die Potenzen von $1/m$ die entscheidenden Terme sind: Je höher die Potenz von $1/m$ ist, mit der ein auftretender Operator multipliziert wird, desto kleiner wird die Schranke für das Bild eines nichtrelativistischen Vektors unter diesem Operator. Natürlich haben wir es nach wie vor mit unbeschränkten Operatoren zu tun.

Bemerkung 3.4. Die Voraussetzung (3.8) lässt sich abschwächen auf die Forderung, dass \mathcal{Q} und \mathcal{E} von keiner geringeren Ordnung in $1/m$ sind als $(1/m)^0$ (siehe [FW], S. 34).

Der letzte Term in (3.6)

$$i[S, \mathcal{Q}] = i[-i \frac{\beta \mathcal{Q}}{2m}, \mathcal{Q}] = \frac{1}{2m} [\beta \mathcal{Q}, \mathcal{Q}] = \frac{1}{m} \beta \mathcal{Q}^2$$

ist gerade und spielt daher keine Rolle – uns geht es ja nur darum, die ungeraden Terme zu minimieren; die geraden dürfen (und müssen) sich dabei nach belieben ändern.

Bemerkung 3.5. Man muss nicht $1/m$ als Entwicklungsparameter auffassen, sondern man kann auch v/c etc. verwenden (siehe auch Kapitel 3.6). Es hängt vom physikalischen Problem ab, nach welchem Parameter man am geeignetsten entwickelt ([V], S. 165).

Bemerkung 3.6. Die ganze Foldy-Wouthuysen-Entwicklung lässt sich auch komplett ohne i 's rechnen (siehe Kapitel 3.7).

Berechnen wir nun den transformierten Dirac-Operator (3.4) komplett bis zu den Termen der Ordnung $1/m^3$. Weil wir Q und \mathcal{E} als unabhängig von m vorausgesetzt haben (3.8), ist die Ordnung eines Terms allein durch die in ihm explizit auftretende Potenz von $1/m$ bestimmt. Eine Entwicklung von Q oder \mathcal{E} nach dem Parameter m oder $1/m$ findet nicht statt. Wir erhalten:

$$\begin{aligned}\frac{i^2}{2}[S, [S, H]] &= -\frac{\beta Q^2}{2m} - \frac{1}{8m^2}[Q, [Q, \mathcal{E}]] - \frac{1}{2m^2}Q^3 \\ \frac{i^3}{3!}[S, [S, [S, H]]] &= \frac{Q^3}{6m^2} - \frac{1}{6m^3}\beta Q^4 - \frac{\beta}{48m^3}([Q^3, \mathcal{E}] + 3Q[\mathcal{E}Q, Q]) \\ \frac{i^4}{4!}[S, [S, [S, [S, H]]]] &= \frac{\beta Q^4}{24m^3} + \dots\end{aligned}$$

Nun sammeln wir alles zusammen und sortieren nach gerade und ungerade; es handelt sich um die 1. Näherung, daher nennen wir sie

$$\begin{aligned}H_1 &= \beta m + \mathcal{E} + \underbrace{\frac{\beta Q^2}{2m} - \frac{1}{8m^2}[Q, [Q, \mathcal{E}]] - \frac{\beta Q^4}{8m^3}}_{=: \mathcal{E}_1} + \\ &\quad + \underbrace{\frac{\beta}{2m}[Q, \mathcal{E}] - \frac{Q^3}{3m^2} - \frac{\beta}{48m^3}[\beta Q, [Q, [Q, \mathcal{E}]]]}_{=: Q_1} + \dots\end{aligned}\tag{3.9}$$

Die Punkte am Ende sollen daran erinnern, dass wir nur Terme bis zur Ordnung $1/m^3$ berechneten. Der ungerade Teil von H_1 ist von der Ordnung $1/m$. Damit sind seine Auswirkungen im nichtrelativistischen Bereich (3.3) deutlich geringer als beim ursprünglichen Operator H . Wir wollen den ungeraden Teil aber noch weiter reduzieren, deshalb führen wir einen weiteren Schritt der Foldy-Wouthuysen-Transformation für ein Teilchen in einem Feld durch. Ausgangsoperator ist jetzt $H_1 = \beta m + \mathcal{E}_1 + Q_1$. Der Transformationsoperator S ist jetzt

$$S_1 := -i \frac{\beta Q_1}{2m},$$

er enthält immer den gesamten ungeraden Anteil der vorherigen Näherung. Wir führen die explizite Berechnung der nächsten Näherung wieder nur bis zu Termen der Ordnung $1/m^3$ durch. Das Ergebnis lautet

$$\begin{aligned}
H_2 &= \beta m + \mathcal{E}_1 - \underbrace{\frac{\beta}{8m^3} [\mathcal{Q}, \mathcal{E}]^2}_{=: \mathcal{E}_2} + \\
&\quad + \frac{1}{4m^2} [[\mathcal{Q}, \mathcal{E}], \mathcal{E}] - \frac{\beta}{6m^3} [\mathcal{Q}^3, \mathcal{E}] - \frac{\beta}{8m^3} ([\mathcal{Q}, \mathcal{E}] \mathcal{Q}^2 + \mathcal{Q}^2 [\mathcal{Q}, \mathcal{E}]) + \dots
\end{aligned}$$

Wie man sieht werden die Ausdrücke rasch kompliziert, obwohl die Notation mit den Kommutatoren noch relativ handliche Formeln liefert (vgl. die Ausdrücke in Kapitel 3.4).

Wir machen jetzt noch zwei Schritte, bis in der 4. Näherung der transformierte Dirac-Operator nur noch ungerade Operatoren ab der Ordnung $1/m^4$ enthält:

$$\begin{aligned}
H_3 &= \beta m + \mathcal{E}_2 + \frac{\beta}{8m^3} [[[\mathcal{Q}, \mathcal{E}], \mathcal{E}], \mathcal{E}] + \dots \\
H_4 &= \beta m + \mathcal{E}_2 + \dots \\
&= \beta m + \mathcal{E} + \frac{\beta \mathcal{Q}^2}{2m} - \frac{1}{8m^2} [\mathcal{Q}, [\mathcal{Q}, \mathcal{E}]] - \frac{\beta \mathcal{Q}^4}{8m^3} - \frac{\beta}{8m^3} [\mathcal{Q}, \mathcal{E}]^2 + \dots
\end{aligned} \tag{3.10}$$

3.3 Bemerkungen zur sukzessiven Foldy-Wouthuysen-Transformation

Bemerkung 3.7. Ein Zweck der Foldy-Wouthuysen-Transformation ist, den nichtrelativistischen Grenzwert der Dirac-Gleichung ermitteln zu können. Das kann man natürlich auch auf eine andere Weise. [T] macht dies auf eine mathematisch korrekte Art, indem er den Dirac-Operator (3.1) als Schar $H = H(c)$ von Operatoren auffasst und c gegen unendlich gehen lässt (nach geeigneter Umschreibung von H , um einen vernünftigen Grenzwert zu erhalten) ([T], S. 177–192). Das mathematische Hauptwerkzeug zur Untersuchung der Parameter-Abhängigkeit einer Schar von unbeschränkten Operatoren (die keinen gemeinsamen Definitionsbereich haben müssen!) ist die Resolvente. Für einen beliebigen selbstadjungierten Operator A und $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ ist die Resolvente definiert als der beschränkte Operator $(A - z)^{-1}$ ([T], S. 178). Mit dieser Methode lässt sich die Dirac-Gleichung im nichtrelativistischen Grenzfall mit Korrekturtermen (3.10) mathematisch exakt berechnen (vgl. [T], Gleichung (6.79)).

Bemerkung 3.8. B. Kursunoglu hat eine unitäre Transformation gefunden, mit der man eine exakte Trennung der Lösungen zu positiver und negativer Energie der Dirac-Gleichung (3.1) in einem beliebigen äußeren elektromagnetischen Feld erhält. Diese Transformation kann jedoch „unendlich“ sein und eine „endliche“ Lösung braucht nicht zu existieren ([Me], S. 527f.).

3.4 Die sukzessive Foldy-Wouthuysen-Transformation in Matrixdarstellung

Wir wollen jetzt die Foldy-Wouthuysen-Transformation für ein Teilchen in einem Feld in der Matrixdarstellung angeben und wieder die Bezeichnungen der mathematischen Literatur verwenden.

3.4.1. Der abstrakte Dirac-Operator für ein Teilchen in einem Feld lautet

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} m+a & B \\ B^* & -m+d \end{pmatrix}; \quad (3.11)$$

dabei ist m eine nichtnegative Konstante, a und d sind symmetrische Operatoren und B ist ein abgeschlossener Operator; alle sind unabhängig von m . Wir verwenden die Konvention, dass Konstanten als Vielfache des Identitätsoperators aufgefasst werden, wenn es der Kontext verlangt.

Wie im Fall des freien Teilchens zerlegen wir auch den Dirac-Operator (3.11):

$$\tilde{A} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & B \\ B^* & 0 \end{pmatrix}}_{=: \tilde{Q}} + \underbrace{\begin{pmatrix} m & 0 \\ 0 & m \end{pmatrix}}_{=: \tilde{M}} + \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_{=: \tilde{J}} + \underbrace{\begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix}}_{=: \tilde{E}}$$

Bemerkung 3.9. Das B hier ist nicht mit dem B des freien Dirac-Operators (2.14) identisch.

Mit diesen Bezeichnungen schreiben wir jetzt die 1. Näherung (3.9) nochmals auf, wobei wir der Einfachheit halber den letzten Term mit dem Dreifach-Kommutator weglassen:

$$\tilde{A}_1 = m\tilde{J} + \tilde{E} + \frac{\tilde{J}\tilde{Q}^2}{2m} - \frac{1}{8m^2}[\tilde{Q}, [\tilde{Q}, \tilde{E}]] - \frac{\tilde{J}\tilde{Q}^4}{8m^3} + \frac{\tilde{J}}{2m}[\tilde{Q}, \tilde{E}] - \frac{\tilde{Q}^3}{3m^2}$$

Bemerkung 3.10. Wir erinnern ab jetzt nicht mehr daran, dass es sich bei jeder Näherung eigentlich um eine unendliche Reihe in $1/m^n$ handelt, von der wir nur Terme bis zur Ordnung $1/m^3$ berechnen und aufschreiben.

Nun machen wir die Zwischenrechnungen

$$\begin{aligned} \tilde{Q}^2 &= \begin{pmatrix} BB^* & 0 \\ 0 & B^*B \end{pmatrix}, \quad \tilde{Q}^3 = \begin{pmatrix} 0 & BB^*B \\ B^*BB^* & 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{Q}^4 = \begin{pmatrix} BB^*BB^* & 0 \\ 0 & B^*BB^*B \end{pmatrix}, \\ [\tilde{Q}, \tilde{E}] &= \begin{pmatrix} 0 & -aB + Bd \\ B^*a - dB^* & 0 \end{pmatrix}, \\ [\tilde{Q}, [\tilde{Q}, \tilde{E}]] &= \begin{pmatrix} B(B^*a - dB^*) + (aB - Bd)B^* & 0 \\ 0 & B^*(-aB + Bd) - (B^*a - dB^*)B \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Damit erhalten wir

$$\tilde{A}_1 = \left(\begin{array}{c|c} m + a + \frac{1}{2m}BB^* - \frac{1}{8m^2}[B(B^*a - dB^*) + (aB - Bd)B^*] - \frac{1}{8m^3}BB^*BB^* & \frac{1}{2m}(-aB + Bd) - \frac{1}{3m^2}BB^*B \\ \hline -\frac{1}{2m}(B^*a - dB^*) - \frac{1}{3m^2}B^*BB^* & -m + d - \frac{1}{2m}B^*B - \frac{1}{8m^2}[B^*(-aB + Bd) - (B^*a - dB^*)B] + \frac{1}{8m^3}B^*BB^*B \end{array} \right)$$

Wir sehen, dass die Formeln in der Matrixdarstellung rasch kompliziert werden. Im nächsten Schritt müsste man den ganzen Ausdruck in der rechten oberen Ecke als neues B verwenden usw.

3.4.2. Schauen wir uns noch eine andere Darstellung an. Statt Entwicklungssatz 3.3 wollen wir die übliche Reihendarstellung der Exponentialfunktion

$$e^{iS} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(iS)^n}{n!} \quad (3.12)$$

benutzen. Definitionsbereiche wollen wir wieder außer Acht lassen.

Wir hatten

$$S := -i \frac{\beta Q}{2m}$$

gewählt (siehe (3.7)). Setzen wir zur Vereinfachung

$$T := iS = \frac{\beta Q}{2m}$$

und berechnen wir die ersten Potenzen von T

$$\begin{aligned} T^0 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & T &= \frac{1}{2m} \begin{pmatrix} 0 & B \\ -B^* & 0 \end{pmatrix}, \\ T^2 &= \frac{1}{(2m)^2} \begin{pmatrix} -BB^* & 0 \\ 0 & -B^*B \end{pmatrix}, & T^3 &= \frac{1}{(2m)^3} \begin{pmatrix} 0 & -BB^*B \\ B^*BB^* & 0 \end{pmatrix}, \\ T^4 &= \frac{1}{(2m)^4} \begin{pmatrix} BB^*BB^* & 0 \\ 0 & B^*BB^*B \end{pmatrix}, & T^5 &= \frac{1}{(2m)^5} \begin{pmatrix} 0 & BB^*BB^*B \\ -B^*BB^*BB^* & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Wir erkennen ein System im Aufbau der Potenzen von T : Zunächst sind alle geraden Potenzen gerade im Sinne von Definition 2.1 und alle ungeraden Potenzen sind ungerade Operatoren. Alle Matrixelemente alternieren im Vorzeichen. Die Elemente in der Hauptdiagonale bestehen aus steigenden Potenzen von BB^* bzw. B^*B , beginnend mit der Potenz 0. Das erinnert an den Cosinus. Dazu müssen wir die Operatoren

$$\begin{aligned} |B^*| &:= (BB^*)^{1/2}, \\ |B| &:= (B^*B)^{1/2} \end{aligned}$$

einführen, die laut einem wohlbekannten Satz von John von Neumann dicht definiert und positiv sind (Näheres z. B. bei [Yo], S. 200). Damit lassen sich die Hauptdiagonal-Einträge von e^T angeben: $\cos \frac{|B^*|}{2m}$ sowie $\cos \frac{|B|}{2m}$.

In der Nebendiagonale sind die Verhältnisse geringfügig komplizierter. Wir haben keine vollständigen Potenzen von $|B|$ bzw. $|B^*|$ vorliegen. Es ist folgende Zwischenrechnung notwendig:

$$\begin{aligned}\Sigma &= \frac{B}{2m} - \frac{BB^*B}{3!(2m)^3} + \frac{BB^*BB^*B}{5!(2m)^5} - + \dots \\ \Rightarrow B^* \Sigma &= \frac{B^*B}{2m} - \frac{B^*BB^*B}{3!(2m)^3} + \frac{B^*BB^*BB^*B}{5!(2m)^5} - + \dots \\ &= (B^*B)^{1/2} \left(\frac{(B^*B)^{1/2}}{2m} - \frac{(B^*B)^{3/2}}{3!(2m)^3} + \frac{(B^*B)^{5/2}}{5!(2m)^5} - + \dots \right) \\ \Rightarrow \Sigma &= \frac{1}{B^*} |B| \sin \frac{|B|}{2m}\end{aligned}$$

Mit einer analogen Rechnung kann man auch das zweite Nebendiagonal-Element berechnen und erhält insgesamt

$$e^{iS} = \begin{pmatrix} \cos \frac{|B^*|}{2m} & \frac{1}{B^*} |B| \sin \frac{|B|}{2m} \\ -\frac{1}{B} |B^*| \sin \frac{|B^*|}{2m} & \cos \frac{|B|}{2m} \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

Der inverse Operator e^{-iS} hat in der Nebendiagonale umgekehrte Vorzeichen und stimmt sonst mit (3.13) überein, wie man sich leicht überlegt.

Bemerkung 3.11. Mit Hilfe der Potenzreihendarstellungen lassen sich folgende Vertauschungsregeln herleiten:

$$\begin{aligned}(\cos |B|)B^* &= B^* \cos |B^*| \\ (\cos |B^*|) \frac{1}{B^*} &= \frac{1}{B^*} \cos |B| \\ |B|(\sin |B|)B^* &= B^* |B^*| \sin |B^*| \\ \frac{1}{B^*} |B|(\sin |B|) &= |B^*|(\sin |B^*|) \frac{1}{B^*}\end{aligned}$$

Mit ihrer Hilfe lässt sich etwa zur Kontrolle nachrechnen, dass auch für die berechneten Matrizen $e^{iS}e^{-iS} = 1$ gilt (wird hier nicht durchgeführt). Weiters kann man zur Kontrolle überprüfen, ob die Definitionsmengen der beteiligten Operatoren in der Matrixdarstellung zusammenpassen.

Wenden wir nun die Transformationsmatrizen an:

$$\begin{aligned}
\tilde{A}_1 &= \begin{pmatrix} \cos \frac{|B^*|}{2m} & \frac{1}{B^*} |B| \sin \frac{|B|}{2m} \\ -\frac{1}{B} |B^*| \sin \frac{|B^*|}{2m} & \cos \frac{|B|}{2m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & D \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos \frac{|B^*|}{2m} & \frac{1}{B^*} |B| \sin \frac{|B|}{2m} \\ -\frac{1}{B} |B^*| \sin \frac{|B^*|}{2m} & \cos \frac{|B|}{2m} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \tag{3.14}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{mit } a_{11} &= \left(\cos \frac{|B^*|}{2m} \right) \left(A \cos \frac{|B^*|}{2m} + |B^*| \sin \frac{|B^*|}{2m} \right) + \frac{1}{B^*} |B| \left(\sin \frac{|B|}{2m} \right) \left(B^* \cos \frac{|B^*|}{2m} + D \frac{1}{B} |B^*| \sin \frac{|B^*|}{2m} \right) \\
a_{12} &= \left(\cos \frac{|B^*|}{2m} \right) \left(-A \frac{1}{B^*} |B| \sin \frac{|B|}{2m} + B \cos \frac{|B|}{2m} \right) + \frac{1}{B^*} |B| \left(\sin \frac{|B|}{2m} \right) \left(-|B| \sin \frac{|B|}{2m} + D \cos \frac{|B|}{2m} \right) \\
a_{21} &= \\
&= -\frac{1}{B} |B^*| \left(\sin \frac{|B^*|}{2m} \right) \left(A \cos \frac{|B^*|}{2m} + |B^*| \sin \frac{|B^*|}{2m} \right) + \left(\cos \frac{|B|}{2m} \right) \left(B^* \cos \frac{|B^*|}{2m} + D \frac{1}{B} |B^*| \sin \frac{|B^*|}{2m} \right) \\
a_{22} &= -\frac{1}{B} |B^*| \left(\sin \frac{|B^*|}{2m} \right) \left(-A \frac{1}{B^*} |B| \sin \frac{|B|}{2m} + B \cos \frac{|B|}{2m} \right) + \left(\cos \frac{|B|}{2m} \right) \left(-|B| \sin \frac{|B|}{2m} + D \cos \frac{|B|}{2m} \right)
\end{aligned}$$

Damit haben wir einen geschlossenen Ausdruck für die 1. Näherung des transformierten Dirac-Operators gefunden. Dieser Ausdruck ist gleichwertig zu dem Verfahren der Physiker, das auf Entwicklungssatz 3.3 basiert. Es lässt sich (3.14) zur Berechnung der 1. Näherung \tilde{A}_1 bis zu jeder gewünschten Ordnung in $1/m$ verwenden, obwohl dafür Entwicklungssatz 3.3 natürlich viel effizienter ist, vor allem wenn man daran denkt, weitere Näherungen zu berechnen, wo die Matrixdarstellung total unhandliche Ausdrücke liefern würde. Der Vorteil von der Darstellung (3.14) ist es, einmal zu sehen, wie die Foldy-Wouthuysen-Transformation für ein Teilchen in einem Feld in der Matrixdarstellung aussieht.

Wir wollen zur Kontrolle nachrechnen, ob die Nebendiagonal-Elemente a_{12} und a_{22} tatsächlich von 1. Ordnung in $1/m$ sind. Dazu behalten wir von den Cosinus- und Sinus-Termen nur jene Glieder ihrer Potenzreihen-Entwicklung, die zu Termen von höchstens 1. Ordnung in $1/m$ führen:

$$\begin{aligned}
a_{12} &\approx -A \frac{1}{B^*} |B| \frac{|B|}{2m} + B + \frac{1}{B^*} |B| \frac{|B|}{2m} D = -A \frac{1}{B^*} \frac{B^* B}{2m} + B + \frac{1}{B^*} \frac{B^* B}{2m} D \\
&= -\frac{AB}{2m} + B + \frac{BD}{2m} \\
a_{22} &\approx -\frac{1}{B} |B^*| \frac{|B^*|}{2m} A + B^* + D \frac{1}{B} |B^*| \frac{|B^*|}{2m} = -\frac{B^* A}{2m} + B^* + \frac{DB^*}{2m}
\end{aligned}$$

Wenn wir jetzt wieder $A = m + a$, $D = -m + d$ einsetzen, erhalten wir

$$\begin{aligned}
a_{12} &\approx -\frac{(m+a)B}{2m} + B + \frac{B(-m+d)}{2m} = \frac{1}{2m} (-aB + Bd) \\
a_{22} &\approx -\frac{B^*(m+a)}{2m} + B^* + \frac{(-m+d)B^*}{2m} = \frac{1}{2m} (-B^*a + dB^*).
\end{aligned}$$

Die Terme nullter Ordnung in $1/m$ fallen tatsächlich weg und nebenbei sehen wir, dass die Terme von 1. Ordnung in $1/m$ mit den entsprechenden Ausdrücken in (3.9), die der Entwicklungssatz 3.3 lieferte, übereinstimmen.

Bemerkung 3.12. Es soll nochmals daran erinnert werden, dass in diesem Kapitel alle Rechnungen nur formale Rechnungen sind – ohne Rücksicht auf Definitionsbereiche. Diese würden u. U. immer kleiner, je öfter man den Operator S in (3.12) iteriert. Das lässt sich umgehen, indem man e^{iS} auf eine andere Art erklärt:

$$e^{iS} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i}{n}S\right)^{-n}$$

Der Operator $\left(1 - \frac{i}{n}S\right)^{-1}$ ist bis auf einen konstanten Faktor die Resolvente des selbstadjungierten Operators $-S$ (siehe [K], S. 479). Wenn Ergebnisse nur für Elemente eines gewissen Teilraums erhalten werden, dann kann dies also daran liegen, dass man eine ungünstige Definition gewählt hat.

3.5 Diagonaldarstellung mit Winkeloperatoren

Wenn der i. A. nicht supersymmetrische Dirac-Operator

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} m+a & B \\ B^* & -m+d \end{pmatrix}$$

beschränkte Operatoren a und d besitzt, die die Abschätzung

$$\|a\|, \|d\| < m$$

gestatten, dann sind alle Voraussetzungen erfüllt, um eine Diagonalisierung wie im Fall des freien Dirac-Operators (2.25) durchführen zu können (das positive und negative Spektrum von \tilde{A} bleibt getrennt). Wir erhalten so die Diagonalisierung

$$\begin{pmatrix} I & -K^* \\ K & I \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} m+a & B \\ B^* & -m+d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & -K^* \\ K & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m+a+BK & 0 \\ 0 & -m+d-B^*K^* \end{pmatrix}, \quad (3.15)$$

die nach dem Vorbild (2.26) auch mit unitären Transformationsmatrizen durchgeführt werden kann ([LT], Theorem 5.1).

[V] schreibt, dass man sich von einer Darstellung der Foldy-Wouthuysen-Transformation für ein Teilchen im Feld in geschlossenen Ausdrücken weitere Einblicke erwarten kann ([V], S. 177). Die Darstellung (3.15) könnte ein Ansatzpunkt in diese Richtung sein. Ein Nachteil von (3.15), der noch ausgeräumt werden müsste, ist der i. A. nur schwer explizit berechenbare Winkeloperator K . Selbst unter den vereinfachenden Supersymmetrie-Annahmen (2.18)–(2.20) ist er ein komplizierter Ausdruck (2.27), der soweit bisher bekannt ist nur durch Herumprobieren und Knobelei gefunden werden kann. Irgendein systematisches Verfahren, eventuell eine Näherung, die eine Reihe oder andere Entwicklung liefert, wäre wünschenswert.

3.6 Konvergenzfragen

Die Physiker denken nicht daran, m gegen unendlich gehen zu lassen. Sie bilden keinen expliziten mathematischen Limes, sondern treffen einfach eine Aussage für hinreichend gut der nichtrelativistischen Näherung genügenden Belegungen der Variablen in der Dirac-Theorie, entsprechend (3.3). Auch Konvergenzprobleme sind für sie von untergeordneter Bedeutung, weil sie ohnehin nur die ersten Korrekturglieder brauchen können – dann werden die Effekte, die die Dirac-Gleichung vernachlässigt (siehe ersten Absatz in 3.1), dominierend.

Ich zitiere einige Literaturstellen zu Konvergenzfragen über die sukzessive Foldy-Wouthuysen-Entwicklung nach Satz 3.3:

„Die Konvergenzuntersuchung für diese Entwicklung ist schwierig. Sehr wahrscheinlich handelt es sich in den meisten Fällen um eine asymptotische Entwicklung nach Potenzen des Operators p/m , d.h. nach Potenzen von (\hbar/mc) grad (und von $\partial/m\partial t$, d.h. von $(\hbar/mc^2)\partial/\partial t$), so daß die aufeinanderfolgenden Glieder der Reihe um so schneller klein werden, je weniger sich das Potential (A, φ) über eine Länge von der Größe \hbar/mc (und über ein Zeitintervall von der Größe \hbar/mc^2 , einem Intervall, in dem die Compton-Länge mit Lichtgeschwindigkeit zurückgelegt wird) ändert.“ ([M], S. 418; vgl. [FW], Fußnote 10)

In der Originalarbeit von Foldy und Wouthuysen werden diese Aussagen auf andere Art angegeben (lt. [FW], Fußnote 10 ist dies äquivalent):

„To define *weak interactions* in a more quantitative fashion, we prescribe that the interaction terms have no Fourier components comparable with or greater than m , so that no transitions between free-particle states with energy differences of this latter order of magnitude are possible; and that the interaction terms have no space Fourier components comparable with or greater than m , so that no transitions between free-particle states with momentum differences of this order of magnitude are possible. Under these conditions, if the initial state is one in which no high momentum states occur, then the momentum of the particle will remain small compared to m under the influence of the interactions.“ ([FW], S. 34)

Weiters heißt es:

„While it can hardly be expected that this series is convergent, the series is presumably an asymptotic or semi-convergent series in the sense that the sum of a finite number of terms of the series is a better-and-better approximation to the true Hamiltonian, the larger the value of m , provided the magnitude of the interaction remains fixed.“ (ebd.)

Andere Autoren schreiben:

„It is not known at present [1970] when such a field can be used, whereas nothing at all is known about convergence problems in such a case.“ ([V], S. 151)

„Up to now [1970] nothing conclusive is known about the region of validity of a nonrelativistic approximation of the Dirac hamiltonian. One obvious condition is that there should be a clear cut between positive and negative energy solutions. It is unknown whether more conditions have to be satisfied. Furthermore it is obvious that it depends on the potentials whether the non-relativistic approximation converges or is an asymptotic series. No information on this is available.“ ([V], S. 177)

„Recently Thaller (1992) ... has thrown some doubt on the mathematical rigour of the Foldy-Wouthuysen transformation. Under some circumstances terms in the expansion of order $1/c^4$ and higher may be singular. However, what we have covered in this chapter reproduces the non-relativistic limit plus corrections, and seems to be valid provided the potentials do not become of order $2mc^2$.“ ([St], S. 225)

Im Fall des Wasserstoffatoms kann man explizit die möglichen Energieniveaus des Elektrons (= Eigenwerte des zugehörigen Dirac-Operators) bestimmen. Diese Werte kann man mit jenen vergleichen, die man durch die Foldy-Wouthuysen-Transformation erhält. Soweit ich eruieren konnte, wurde ein strenger Beweis der Korrektheit der Foldy-Wouthuysen-Transformation *für diesen Fall* nicht erbracht, aber immerhin ein Koeffizientenvergleich für die ersten Terme (siehe [B], S. 63–67, insbesondere Gleichung (4.14)).

3.7 Im Fall der Supersymmetrie

Wir wollen uns jetzt ansehen, welche Ergebnisse die sukzessive Foldy-Wouthuysen-Transformation bringt, wenn man sie auf ein freies Teilchen anwendet. Einem Physiker würde diese Fragestellung reichlich absurd vorkommen, aber der Mathematiker erhofft sich davon irgendeine weitere Einsicht, die zum Verstehen der beiden Foldy-Wouthuysen-Transformationen beiträgt und eventuell zu Verallgemeinerungen oder Anwendungen in anderen Gebieten der Mathematik verhilft.

Ausgangspunkt ist also wieder der Dirac-Operator

$$\tilde{A} = m\tilde{J} + \tilde{E} + \tilde{Q},$$

jetzt mit der Supersymmetrie-Forderung

$$[\tilde{E}, \tilde{Q}] = 0. \tag{3.16}$$

Wir erinnern, dass die Supersymmetrie-Eigenschaft nach Definition 2.12 Bedingung dafür war, dass man die geschlossen dargestellte Foldy-Wouthuysen-Transformation (Satz 2.17) anwenden konnte. Nichts hindert uns jedoch, den in diesem Fall komplizierteren Weg der sukzessiven Foldy-Wouthuysen-Transformation (nach Satz 3.3) zu gehen. Die Bedingung (3.16) vereinfacht die Formeln sogar erheblich. Wir berechnen die 1. Näherung:

$$\tilde{A}_1 = \tilde{A} + i[S, \tilde{A}] + \frac{i^2}{2!}[S, [S, \tilde{A}]] + \frac{i^3}{3!}[S, [S, [S, \tilde{A}]]] + \frac{i^4}{4!}[S, [S, [S, [S, \tilde{A}]]]] + \dots \quad (3.17)$$

$$S = -\frac{i}{2m} \tilde{J}\tilde{Q}$$

$$i[S, \tilde{A}] = -\tilde{Q} + \frac{1}{2m}[\tilde{J}\tilde{Q}, \tilde{Q}] = -\tilde{Q} + \frac{1}{m} \tilde{J}\tilde{Q}^2$$

$$\frac{i^2}{2!}[S, [S, \tilde{A}]] = -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2m}[\tilde{J}\tilde{Q}, \tilde{Q}] - \frac{1}{2m^2}[\tilde{J}\tilde{Q}, \tilde{J}\tilde{Q}^2]\right) = -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{m} \tilde{J}\tilde{Q}^2 + \frac{1}{m^2} \tilde{Q}^3\right)$$

$$\frac{i^3}{3!}[S, [S, [S, \tilde{A}]]] = \frac{1}{6}\left(-\frac{1}{2m^2}[\tilde{J}\tilde{Q}, \tilde{J}\tilde{Q}^2] - \frac{1}{2m^3}[\tilde{J}\tilde{Q}, \tilde{Q}^3]\right) = \frac{1}{6}\left(\frac{1}{m^2} \tilde{Q}^3 - \frac{1}{m^3} \tilde{J}\tilde{Q}^4\right)$$

$$\frac{i^4}{4!}[S, [S, [S, [S, \tilde{A}]]]] = \frac{1}{24}\left(\frac{1}{2m^3}[\tilde{J}\tilde{Q}, \tilde{Q}^3] - \frac{1}{2m^4}[\tilde{J}\tilde{Q}, \tilde{J}\tilde{Q}^4]\right) = \frac{1}{24}\left(\frac{1}{m^3} \tilde{J}\tilde{Q}^4 + \frac{1}{m^4} \tilde{Q}^5\right)$$

...

Die neuen geraden bzw. ungeraden Anteile sind daher

$$\tilde{E}_1 = \tilde{E} + \frac{1}{m}\left(1 - \frac{1}{2}\right)\tilde{J}\tilde{Q}^2 + \frac{1}{m^3}\left(-\frac{1}{6} + \frac{1}{24}\right)\tilde{J}\tilde{Q}^4 + \dots$$

$$\tilde{Q}_1 = \frac{1}{m^2}\left(-\frac{1}{2} + \frac{1}{6}\right)\tilde{Q}^3 + \frac{1}{m^4}\left(\frac{1}{24} - \frac{1}{120}\right)\tilde{Q}^5 + \dots$$

Wir haben

$$\begin{aligned} [\tilde{J}\tilde{Q}; \tilde{J}\tilde{Q}^n] &= \tilde{J}\tilde{Q}\tilde{J}\tilde{Q}^n - \tilde{J}\tilde{Q}^n\tilde{J}\tilde{Q} = -2\tilde{Q}^{n+1} && \text{für alle geraden } n \\ [\tilde{J}\tilde{Q}; \tilde{Q}^n] &= \tilde{J}\tilde{Q}^{n+1} - \tilde{Q}^n\tilde{J}\tilde{Q} = 2\tilde{J}\tilde{Q}^{n+1} && \text{für alle ungeraden } n. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Für die Mehrfachkommutatoren in der Entwicklung (3.17) vermuten wir ein allgemeines Schema. Der Faktor $1/n!$ kommt überall vor. Ebenso offensichtlich ist die Entwicklung der $1/m$ -Potenzen. Die folgende Übersicht enthält die noch fehlenden Terme: Zuerst die i -Potenz, die vor der Kommutatorklammer steht, dann ein Faktor bestehend aus eben dieser i -Potenz multipliziert mit dem Kehrwert der vorherigen i -Potenz (um auszugleichen, dass wir immer von dem Ergebnis des Kommutators *mit* der i -Potenz ausgehen) multipliziert mit $-i$ von S und zuletzt die Terme laut (3.18).

i^{4n}	$1 \cdot \frac{1}{-i} \cdot (-i)$	$\tilde{J}\tilde{Q}^{4n}$	\tilde{Q}^{4n+1}
i^{4n+1}	$i \cdot 1 \cdot (-i)$	$-\tilde{Q}^{4n+1}$	$\tilde{J}\tilde{Q}^{4n+2}$
i^{4n+2}	$-1 \cdot \frac{1}{i} \cdot (-i)$	$-\tilde{J}\tilde{Q}^{4n+2}$	$-\tilde{Q}^{4n+3}$
i^{4n+3}	$-i \cdot (-1) \cdot (-i)$	\tilde{Q}^{4n+3}	$-\tilde{J}\tilde{Q}^{4n+4}$

Wir sehen: Das erste Produkt ist immer gleich 1 (wir hätten also die ganze Aufgabe gleich von vorneherein ohne i 's angeben und rechnen können), die \tilde{Q} -Terme bilden tatsächlich eine Rekursion.

Mit diesem Ergebnis lassen sich jetzt leicht \tilde{E}_1 und \tilde{Q}_1 komplett angeben:

$$\begin{aligned}\tilde{E}_1 &= \tilde{E} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{m^{2n-1}} \left(\frac{1}{(2n-1)!} - \frac{1}{(2n)!} \right) \tilde{J} \tilde{Q}^{2n} = \tilde{E} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{m^{2n-1}} \frac{2n-1}{(2n)!} \tilde{J} \tilde{Q}^{2n} \\ \tilde{Q}_1 &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{m^{2n}} \left(\frac{1}{(2n)!} - \frac{2n}{(2n+1)!} \right) \tilde{Q}^{2n+1} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{m^{2n}} \frac{2n}{(2n+1)!} \tilde{Q}^{2n+1}\end{aligned}\quad (3.19)$$

Das war erst der 1. Schritt der sukzessiven Foldy-Wouthuysen-Transformation. Die nächsten Schritte führen leider auf sehr komplizierte Formeln, da jetzt bei jedem Kommutator zweimal unendlich viele Terme zu berücksichtigen sind. Mit der Methode (3.17) kommen wir nicht an das Ziel, eine überblickbare Darstellung des transformierten Dirac-Operators \tilde{A}_∞ nach unendlich vielen Schritten zu erhalten. Nur so viel lässt sich noch sagen:

- \tilde{E}_∞ ist von der Form $\tilde{E} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{m^{2n-1}} \cdot \text{Koeffizient}(n) \cdot \tilde{J} \tilde{Q}^{2n}$
- Die Terme bis $\tilde{J} \tilde{Q}^6$ in (3.19) sind bereits fix für alle weiteren Schritte.
- Der ungerade Anteil \tilde{Q}_n ist von der Ordnung $1/m^{2n}$.
- Die Koeffizienten in der Entwicklung werden sehr rasch klein, da im Nenner in jedem Schritt eine weitere Fakultät hinzukommt.

Der transformierte Dirac-Operator \tilde{A}_∞ ist offenbar nicht identisch mit dem durch die Foldy-Wouthuysen-Transformation für ein freies Teilchen transformierten. Da beide Transformationen unitär sind und den Dirac-Operator \tilde{A} diagonalisieren, sollte der Übergang zwischen den zwei Transformationen selbst eine unitäre Transformation sein, und zwar eine, die die Teilräume $\tilde{\mathcal{L}}_+$ und $\tilde{\mathcal{L}}_-$ invariant lässt.

3.8 Andere Methoden

Dirac versuchte, durch Multiplikation des Dirac-Operators (3.1) mit einem geeigneten Faktor, die vierkomponentige Dirac-Gleichung für ein Teilchen im Feld in 1. Näherung in zwei zweikomponentige Gleichungen zu entkoppeln. Dabei kommt zwar das richtige magnetische Dipolmoment für das Elektron heraus, aber fälschlicherweise auch ein imaginäres elektrisches Dipolmoment. Heute weiß man, dass dieses frühe Verfahren nicht adäquat ist, um das gewünschte zu erreichen ([V], S. 150).

Pauli gab eine systematischere Prozedur an („Paulis Eliminationsverfahren“), um die zwei kleinen Komponenten der Dirac-Gleichung zu eliminieren. Diese Methode besteht im wesentlichen darin, eine der beiden zweikomponentigen Differentialgleichungen im nichtrelativistischen Grenzfall näherungsweise zu lösen und in die andere einzusetzen. Doch auch diese Methode ist nicht frei von Schwierigkeiten: Die Terme höherer Ordnung sind nicht selbstadjungiert, obwohl es der ursprüngliche Dirac-Operator ohne Zweifel ist ([V], 168–172). Es sieht so aus, als ob Paulis „naives“ Eliminationsverfahren auf eine nichtunitäre Transformation hinausläuft. Achiezer und Beresteckij machten daraus eine unitäre Transformation, indem sie intuitive Argumente verwendeten ([V], S. 151, 170–175).

Foldy und Wouthuysen waren die ersten, die ein Verfahren zur Reduktion des Dirac-Operators (3.1) auf eine zweikomponentige Theorie angaben, das frei von jeder fundamentalen Schwierigkeit war ([V], S. 164).

1958 gab Eriksen ein systematischeres Verfahren zum Finden einer unitären Transformation auf Diagonalgestalt an, das sich sehr gut zur Verallgemeinerung der Foldy-Wouthuysen-Transformation eignet ([V], S. 153, 167f.). In der Hauptsache handelt es sich bei der Eriksen-Methode um einen anderen Ansatz als (2.12). Das Ergebnis ist nicht identisch mit, aber unitär-äquivalent zu dem der Foldy-Wouthuysen-Transformation (siehe [V], S. 172f., insbesondere Gleichung (138)). Noch einen anderen Ansatz verwendete Baktavatsalou (siehe [V], S. 155).

Mit Hilfe der Eriksen-Methode kann man nachträglich Paulis Eliminationsverfahren rechtfertigen ([V], S. 175).

Weitere einfache und zugleich allgemeine Methoden zur Diagonalisierung des 2×2 -Dirac-Operators scheinen nicht bekannt zu sein ([V], S. 175).

Literatur

- [B] Bjorken, James D.; Sidney D. Drell: *Relativistische Quantenmechanik*. Mannheim: Bibliographisches Institut, 1966 (Amerik. Original: *Relativistic Quantum Mechanics*, 1964) (Reihe: B. I. Hochschultaschenbücher)
- [Bo] Bognár, János: *Indefinite Inner Product Spaces*. Berlin: Springer, 1974 (Reihe: Ergebnisse der Mathematik und ihrer Grenzgebiete, Band 78)
- [FW] Foldy, Leslie L.; Siegfried A. Wouthuysen: „On the Dirac Theory of Spin 1/2 Particles and Its Non-Relativistic limit“. *Phys. Rev.* **78**, No. 1 (1950) 29–36
- [G] Greiner, Walter: *Relativistische Quantenmechanik. Wellengleichungen*. Thun: Harri Deutsch, 2. Aufl. 1987 (1. Aufl. 1981) (Reihe: Theoretische Physik, Band 6)
- [K] Kato, Tosio: *Perturbation theory for linear operators*. Berlin: Springer, 1966 (Reihe: Die Grundlehren der mathematischen Wissenschaften in Einzeldarstellungen, Band 132)
- [LT] Langer, Heinz; Christiane Tretter: „Spectral invariant subspaces of block operator matrices“ (erscheint in *Operator Theory: Advances and Applications*)
- [M] Messiah, Albert: *Quantenmechanik*, Band 2. Berlin: de Gruyter, 3. Aufl. 1990 (Franz. Original: *Mécanique Quantique*, Tome 2, 1959)
- [Me] Mendlowitz, H.: „High-Energy Electron-Nuclear Scattering“. *Phys. Rev.* **102**, No. 2 (1956) 527–529
- [SSG] Saroja, D.; K. N. Srinivasa Rao; A. V. Gopala Rao: „New aspects of the Foldy-Wouthuysen and Cini-Touschek transformation“. *J. Phys. A. Math. Gen.* **11**, No. 6 (1978) 1185–1190
- [St] Strange, Paul: *Relativistic Quantum Mechanics. With applications in condensed matter and atomic physics*. Cambridge: Cambridge University Press, 1998
- [T] Thaller, Bernd: *The Dirac Equation*. Berlin: Springer, 1992
- [TNC] Toyama, F. M.; Y. Nogami; F. A. B. Coutinho: „Behaviour of wavepackets of the ‘Dirac oscillator’: Dirac representation versus Foldy-Wouthuysen representation“. *J. Phys. A. Math. Gen.* **30** (1997) 2585–2595
- [Y] Ynduráin, Francisco J.: *Relativistic quantum mechanics and introduction to field theory*. Berlin: Springer, 1996 (Spanisches Original: *Mecánica Cuántica Relativista*, 1990) (Reihe: Texts and monographs in physics)
- [Yo] Yosida, Kôzaku: *Functional Analysis*. Berlin: Springer, 4. Aufl. 1974 (1. Aufl. 1964) (Reihe: Die Grundlehren der mathematischen Wissenschaften in Einzeldarstellungen mit besonderer Berücksichtigung der Anwendungsgebiete, Band 123)
- [V] Vries, E. de: „Foldy-Wouthuysen Transformation and Related Problems“. *Fortschr. d. Physik* **18** (1970) 149–182