

# Zusammenfassung Kapitel 9

- Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung nötig,  
um relativistische Formulierung zu erzielen

Ausgangspunkt:  $E^2(p) = p^2 c^2 + m^2 c^4$  (Energie-Impuls-Relation)

enthält als Grenzfall die Schrödinger-Dispersions-  
relation  $E = m c^2 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  ( $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ )

- Klein-Gordon-Gleichung für Spin 0 Teilchen

$$\left( \vec{\nabla}^2 - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 - \lambda_c^{-2} \right) \psi(\vec{r}, t)$$

Die Fundamentallösungen der KG-Gleichung sind  
skalare ebene Wellen  $\psi_{p\pm} \sim e^{i\vec{p}\vec{r} - i E_{\pm}(p)t/\hbar}$

Die 2  $E_{\pm}(p)$  - Zweige bilden die Dispersionsrelation,  
Energie ist aber durch  $|E_{\pm}| > 0$

Beispiel: Pionen

neuter Freiheitsgrad: Ladung  $\pm, 0$

→ Teilchen-Antiteilchen Konzept

- Diracgleichung für Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen

$$i\hbar \partial_t \vec{\psi} = (c \hat{\alpha}^k p_k + \hat{\beta} m c^2) \vec{\psi}$$

Die Fundamentallösungen sind Vektor-ebene Wellen,  
die den Spin freiheitsgrad erhalten:

$$\psi_{p \pm m_s} \sim \begin{pmatrix} \vec{\chi}_{m_s} \\ \hat{\sigma} \vec{\chi}_{m_s} \end{pmatrix} e^{i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - i \frac{E_{\pm}(p)t}{\hbar}}$$

Spin eigenfunktion zu  $m_s = \pm \frac{1}{2}$

Analogie zum Spin und Bahndrehimpuls

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}, \quad \vec{L}$$

Die Energie ist tatsächlich durch  $E_{\pm} \geq 0$  bestimmt,

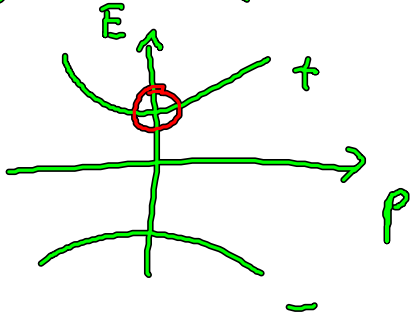
daher um die Diracsee eingeführt werden, um Zersplittern

„reals“ Elektron von  $E^+$  in Zustände  $E^-$  zu verhindern

(Pauliprinzip)

Beispiel: Elektronen

- nicht relativistischer Grenzfall bedeutet die Entwicklung der Diracgleichung, um die Schrödingerlösung um Korrekturen zu erhalten



3 wichtige Korrekturen zur Schrödinger gl.

a) relativistische Energiekorrektur (Dispersion korrigiert)

$$\frac{\vec{p}^2}{2m} \rightarrow \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} \quad \text{„Korrekturen“}$$

$$E = \sqrt{\quad} \approx$$

b) Kontakt / Darwin Term

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{4} \nabla^2 \rho_{\text{Kern}}(r)}{8m^2 c^2 \epsilon_0}, \quad \rho_{\text{Kern}}(r) : \text{Kerndicht}$$

Schrödinger gl. mit Korrekturen:  $\rho_{\text{Kern}}(r) \cdot \vec{\psi}_1(\vec{r})$

Kontaktterm vep Produkt  $\neq 0$

„Elektron im Kontakt mit Kern“

Nachtrag: kommt in der Entwicklung der Diracgleichung als Term mit  $\nabla_r \vec{\psi}_1$  (oder  $\nabla$  im Vgl. zu  $\vec{p}$ )

ist nicht hermitisch!    Proble der Natur!

hermitisch machen des Terms:

$$\partial_r \phi \partial_r \psi_1 \xrightarrow{\substack{\uparrow \\ \text{"hermitisieren"}}} \frac{1}{2} \frac{\rho_{\text{Kern}}}{\epsilon_0}$$

$$\int dr r^2 \psi_1^* \underbrace{\partial_r \phi \partial_r \psi_1}_{\text{reell!}} = \frac{1}{2} \int dr r^2 \left( \psi_1^* \partial_r \phi \partial_r \psi_1 + \underline{\partial_r \psi_1^* \partial_r \phi \psi_1} \right)$$

Kugelkoordinaten, weil  $\int d\phi \int d\theta$  weil  $\phi(r)$  kugelsymmetrisch

$$= \frac{1}{2} \int dr \left( r^2 \psi_1^* \partial_r \phi \partial_r \psi_1 - \psi_1^* \left( \partial_r (r^2 \partial_r \phi) \psi_1 + r^2 \partial_r \phi \partial_r \psi_1 \right) \right)$$

partielle Integration, Randterme weg, Produktregel.

$$= -\frac{1}{2} \int dr \frac{r^2}{r^2} \psi_1^* \partial_r (r^2 \partial_r \phi) \psi_1$$

$$= -\frac{1}{2} \int dr r^2 \psi_1^* \underbrace{\Delta \phi}_{\substack{- \rho_{\text{Kern}}(r) \\ \epsilon_0}} \psi_1 \quad \phi: \text{Kernpotential}$$

(Zitterbewegung des Elektrons ist für diese Terme verantwortlich) selbst!

- Spin - Bah - Kopplung

$$H_{S-B} = \frac{q \partial_r \phi_{\text{em}}}{2m^2 c^2} \vec{s} \cdot \vec{L}$$

← prüfe die Faktoren

beschreibt die Kopplg. von Spin- und Drehimpulsfreiheitsgrad im Ruhesystem des Elektrons wird die Bewegg. des Protons über ein Magnetfeld wahrgenommen, diese Wechsel wirkt mit dem Spin des Elektrons

- Pauli Gleichung beschreibt die Ankopplg der Elektron an externen Felder  $(\vec{E}_{\text{ext}}, \vec{B}_{\text{ext}})$

→  $H_{el}$ ,  $H_{\text{magn.}}$  gibt bevor wir zur Lösung kommen: Hilfsmittel

### III. Näherungsweise und Hilfsmittel

#### 1. Dirac Schreibweise der Quantenmechanik

hier: einfache Notation fördern

Schreibweise f. Basis im Hilbertraum und f. Wellenfunktionen  $(\vec{\psi})(\vec{r}, \vec{s})$  durch Verwendung von Quantenzahlen vereinfachen

i.a. viele Quantenzahlen, H-Atom:  $n, l, m_l \rightarrow \{n\}$

Verbundquantenzahl, hier Typel  $\rightarrow$

Eine Basis mit Quantenzahl  $\{n\}$  wird mit der

Notation  $|n\rangle$  dargestellt (abstrakter Vektor)

Bsp: H-Atom  $|n\rangle \hat{=} \varphi_n(\vec{r}) \Rightarrow |n, l, m\rangle = \varphi_{nlm}(\vec{r})$

Diracbasis  $|n\rangle \hat{=} \varphi_n(\vec{r}, \vec{s}) \Rightarrow |p, \lambda, \mu, s\rangle = \vec{\varphi}_{p\lambda\mu s}(\vec{r}, \vec{s})$

a) Notation einer Basis

$\varphi_n(\vec{r}, \vec{s}) \rightarrow |n\rangle$  "ket"  
 $\varphi_n^*(\vec{r}, \vec{s}) \rightarrow \langle n|$  "bra" } Klammern

b) Basis: Vollständigkeit, Orthogonalität usw

$$\sum_n \varphi_n^*(\vec{r}) \varphi_n(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad \text{Vollständigkeit}$$

$$\int d^3r \sum_n \varphi_n^*(\vec{r}) \varphi_n(\vec{r}) = 1 \quad \text{Einselwert}$$

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = 1 \quad \text{Ergebnis in Dirac Schreibweise}$$

$$\int d^3r \varphi_n^*(\vec{r}) \varphi_{n'}(\vec{r}) = \delta_{nn'} \quad \text{Orthogonalität}$$

$\langle n | n' \rangle = \delta_{nn'}$  bedeutet das Skalarprodukt in Diracschreibweise

### c) Aufspanne eine Funktion

$$\psi(r, t) = \sum_n \underbrace{\int d^3r' \varphi_n^*(r') \varphi_n(r)}_{1 \text{ Element}} \psi(r, t)$$

$$= \sum_n \underbrace{\int d^3r' \varphi_n^*(r') \psi(r', t)} \varphi_n(r)$$

$$\psi(r, t) = \sum_n c_n(t) \varphi_n(r)$$

in Diracschreibweise:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad c_n = \langle n | \psi \rangle$$

### d) Matrixelemente

Erwartungswert ein Operators

$$\int d^3r \psi^*(r, t) \underline{O} \psi(r, t) \Rightarrow \langle \psi | \underline{O} | \psi \rangle$$

oder z.B.

$$\int d^3r \varphi_n^*(r) \underline{O} \varphi_m(r) \Rightarrow \langle n | \underline{O} | m \rangle$$

an dieser Notation müssen Sie sich gewöhnen,

hat nur den Sinn bisl. Dinge schneller und  
übersichtlicher zu schreiben

## 2. Gesamtdrehimpuls

### 2.1. Spin und Bahndrehimpuls im Zentralfeld

H-Atom ohne Spin: Eigenfunktionen sind durch 3  
Quantenzahl beschrieben  $(n, l, m_l)$ , zusätzlich  
Einfüg. ein Spin quantumzahl  $m_s$ ,

$$\vec{\psi}_1 = R_n(r) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) \vec{\chi}_{m_s}$$

Sind die Eigenfunktionen des H-Atoms ohne  
Spin-Bahn-Kopplung.

vertauschbar, vollständiger Satz von Observablen  
legt ein Zustand vollständig fest über die zugehörigen QZ.

bei H-Atom ohne Spin-Bahn-Kopplung:

$$\left\{ \underline{\underline{H}}, \underline{\underline{L^2}}, \underline{\underline{L_3}}, \underline{\underline{\hat{S}^2}}, \underline{\underline{\hat{S}_3}} \right\} \quad s = \frac{1}{2}$$

ist der vollständige Satz von Observablen



oh Spä - Bah - Kopplung

$$\vec{\Psi}_1 = |u, \ell, m_\ell, m_s\rangle \quad |u, \ell, m_\ell, s, m_s\rangle$$

$$\underline{H}_0 |u, \ell, m_\ell, m_s\rangle = \epsilon_n |u, \ell, m_\ell, m_s\rangle \quad \epsilon_n = -\frac{Ry}{n^2}$$

$$\underline{L}^2 |u, \ell, m_\ell, m_s\rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) |u, \ell, m_\ell, m_s\rangle$$

$$\underline{L}_3 |u, \ell, m_\ell, m_s\rangle = \hbar m_\ell |u, \ell, m_\ell, m_s\rangle$$

$$\hat{S}^2 |u, \ell, m_\ell, m_s\rangle = \hbar^2 \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) |u, \ell, m_\ell, m_s\rangle \quad \underline{s = \frac{1}{2}}$$

$$\hat{S}_3 |u, \ell, m_\ell, m_s\rangle = \hbar m_s |u, \ell, m_\ell, m_s\rangle$$

Mit Spä - Bah Kopplung verbunden  $\hat{S}_3$  und  $\underline{L}_3$  nicht mehr

$$\text{mit } \underline{H} = \underline{H}_0 + \underline{H}_{S-B}, \quad \underline{H}_{S-B} = g(r) \underline{L} \cdot \hat{S}$$

↑  
ortsabhängiger Vorfaktor

$$[\underline{L}_3, \underline{H}_{S-B}] \neq 0$$

$$[\underline{L}_3, g(r) \underline{L} \cdot \hat{S}] = g(r) [\underline{L}_3, \underline{L}_1 \hat{S}^1]$$

Zentralpotential,  
nicht von  $\phi$  abhängig

$$= g(r) \left( [\underline{L}_3, \underline{L}_1 \hat{S}^1] + [\underline{L}_3, \underline{L}_2 \hat{S}^2] \right)$$

$$= g(r) i\hbar (\underline{L}_2 \hat{S}^1 - \underline{L}_1 \hat{S}^2)$$

$\underline{L}_3$  und  $\underline{H}$  vertauschen nicht mehr

$m_e$  ist kein gute Quantenzahl mehr um Zustand zu charakterisieren

$$[\hat{s}_3, g(r) \vec{e} \cdot \vec{s}] = g(r) i\hbar (\hat{s}_2 \underline{e}_1 - \underline{e}_2 \hat{s}_1)$$

$$[\underline{e}_3 + \hat{s}_3, H_{S-B}] = 0$$

alle Komponenten analog  $\rightarrow$  der Gesamt Drehimpuls verhalten mit  $H_{S-B}$ .

$\rightarrow$  Einführung des Gesamt Drehimpulses  $\vec{f} = \vec{e} + \vec{s}$

Man kann zeigen, daß

$$[\underline{f}_3, \underline{H}_0 + \underline{H}_{S-B}] = 0 \quad (1)$$

$$[\underline{f}^2, \underline{H}_0 + \underline{H}_{S-B}] = 0 \quad (2)$$

wird durch Rechnen gezeigt

1. Beziehung schon folgt, weil  $[\underline{H}_0, \hat{s}_3] = 0$

$$[\underline{H}_0, \underline{e}_3] = 0 \rightarrow [\underline{H}_0, \underline{f}_3] = 0$$

$$[\underline{H}_{S-B}, \underline{f}_3] = 0$$

$\rightarrow \underline{f}_3$  verhalten mit  $\underline{H} = \underline{H}_0 + \underline{H}_{S-B}$

2. Beziehung wird folgendermaßen gezeigt

$$\hat{J}^2 = (\vec{L} + \vec{S})^2 = \vec{L}^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S} + \vec{S}^2$$

diese Größe vertauschen leicht mit HS-B

H-Atom ohne HS-B

$$|n, l, s = \frac{1}{2}, m_l, m_s \rangle$$

$$\begin{array}{cc} \swarrow & \downarrow \\ \hat{L}_3 & \hat{S}_3 \end{array}$$

Sind keine FF wenn  
HS-B existiert

H-Atom mit HS-B

$$|n, l, s = \frac{1}{2}, j, m_j \rangle$$

$$\begin{array}{cc} \swarrow & \downarrow \\ \hat{J}^2 & \hat{J}_3 \end{array}$$

Aufgrund der Spin-Bahn Kopplung sind  $m_l, m_s$  keine  
"gute" Quantenzahl um die Zustände zu beschreiben,  
alternativ müssen 2 neue QZ eingeführt werden und  
zwar über die Eigenfunktion des Gesamtdrehimpuls.

$$\hat{J}^2 |n, l, s, j, m_j \rangle = \hbar^2 j(j+1) |n, l, s, j, m_j \rangle$$

$$\hat{J}_3 |n, l, s, j, m_j \rangle = \hbar m_j |n, l, s, j, m_j \rangle$$

diese Größen  $j, m_j$  müssen quantisiert  
werden