

Fortsetzung Wasserstoffatom

Dirac gl. $\hat{H} = c \underline{\alpha} p + m_0 c^2 \beta + V(r)$ ↙ rotationssym.

$\rightarrow \hat{H} = c \alpha_r p_r + \frac{ic}{r} \alpha_r \beta \hbar Q + m_0 c^2 \beta + V(r)$

Ersetzung

$p_r = \frac{1}{r} (r p_r - i \hbar)$

$\alpha_r = \frac{1}{r} \underline{\alpha} r$

$\hbar Q = \beta (\tilde{\sigma} L + \hbar)$

1) Winkelanteil: $[\hbar Q, H] = 0$

$\rightarrow \hbar Q |j\rangle = \hbar q |j\rangle$ wobei

$q^2 = (j + \frac{1}{2})^2$

\rightarrow Eigenfunktionen bekannt

(Linearkomb. von Kugelflächenfunktionen)

2)

2) Separation des Radialanteils

$\rightarrow \hat{H} = c \alpha_r p_r + \frac{ic}{r} \hbar q \alpha_r \beta + m_0 c^2 \beta + V(r)$

Erinnerung: $\underline{\alpha}$ nur festgelegt

durch Übergang zur

Klein Gordon Gleichung

• spurlose Matrix

• Eigenwerte ± 1

• antikommutieren mit β

α_r ist nur eine 4×4 Matrix
spezielle Wahl

$$\alpha_r = \begin{pmatrix} 0 & -i\mathbb{1} \\ i\mathbb{1} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \hbar c \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) - \frac{c\hbar q}{r} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + m_0 c^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + V \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Ansatz für Radialteil

$$\begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} \sim \frac{1}{r} \begin{pmatrix} F(r) \\ G(r) \end{pmatrix}$$

$$H \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix}$$

Bindungsenergien

$$E < m_0 c^2$$

(gebundene Zustände)

$$a_1 = \frac{m_0 c^2 + E}{\hbar c} \quad \text{"(etwas groß)"}$$

$$a_2 = \frac{m_0 c^2 - E}{\hbar c} \quad \text{"(etwas klein)"}$$

$$a = \sqrt{a_1 a_2}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \left(\frac{d}{ds} + \frac{a}{s} \right) G - \left(\frac{a_2}{a} - \frac{\mu}{s} \right) F = 0 \\ \left(\frac{d}{ds} - \frac{a}{s} \right) F - \left(\frac{a_1}{a} + \frac{\mu}{s} \right) G = 0 \end{cases} \quad (*)$$

Randbedingungen $F, G \rightarrow 0$ für $s \rightarrow \infty \Rightarrow G \sim e^{-s}$
 $F \sim e^{-s}$

F, G regulär $\Rightarrow G' + \frac{q}{s}G + \frac{\gamma}{s}F = 0$

• $s \rightarrow 0$

$$F' - \frac{q}{s}F - \frac{\gamma}{s}G = 0$$

↳ Ansatz: $F(s) = f_0 s^\lambda$
 $G(s) = g_0 s^\lambda \rightarrow \begin{cases} (\lambda + q)g_0 + \gamma f_0 = 0 \\ (\lambda - q)f_0 - \gamma g_0 = 0 \end{cases}$

Nichttriviale Lösung f_0, g_0 falls

$$(\lambda + q)(\lambda - q) + \gamma^2 = 0$$

$$\lambda^2 - q^2 + \gamma^2 \stackrel{!}{=} 0$$

$$\lambda = \pm \sqrt{q^2 - \gamma^2} > 0$$

regulär bei $s \rightarrow 0$

Ansatz für $\textcircled{1}$ $F(s) = s^\lambda e^{-s} f(s)$

$G(s) = s^\lambda e^{-s} g(s)$

eingesetzt in $\textcircled{1}$

$$g' - g + \frac{\lambda + q}{s}g - \left(\frac{a_2}{a} - \frac{\gamma}{s}\right)f = 0$$

$$f' - f + \frac{\lambda - q}{s}f - \left(\frac{a_1}{a} + \frac{\gamma}{s}\right)g = 0$$

Lösung mit Potenzreihenansatz:

$$f(s) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k s^k, \quad g(s) = \sum_{k=0}^{\infty} g_k s^k$$

$$f'(s) = \sum_{k=1}^{\infty} k f_k s^{k-1} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+1) f_{k+1} s^k$$

$$\frac{f(s)}{s} = \sum_{k=0}^{\infty} f_k s^{k-1} = \frac{f_0}{s} + \sum_{k=0}^{\infty} f_{k+1} s^k$$

für $g'(s)$, $g(s)/s$ analog

Koeffizientenvergleich

$$O\left(\frac{1}{s}\right): \quad (\lambda + \eta) g_0 + \gamma f_0 = 0$$

$$(\lambda - \eta) f_0 - \gamma g_0 = 0 \quad \rightarrow f_0, g_0 \text{ (bis auf Norm.faktoren)}$$

$O(s^k)$, $k=0,1,\dots$:

$$\boxed{\begin{aligned} (\lambda + \eta + k + 1) g_{k+1} - g_k + \gamma f_{k+1} - \frac{a_2}{a} f_k &= 0 & (1) \\ (\lambda - \eta + k + 1) f_{k+1} - f_k - \gamma g_{k+1} - \frac{a_1}{a} g_k &= 0 & (2) \end{aligned}}$$

Rekursion!

$$(1) \cdot a - (2) \cdot a_2 : [a(\lambda + \eta + k + 1) + a_2 \gamma] g_{k+1} = [a_2(\lambda - \eta + k + 1) - a\gamma] f_{k+1} \quad (3)$$

von (3)

• Verhalten für große k : $a k g_{k+1} = a_2 k f_{k+1}$

$$\Rightarrow f_k = \frac{a}{a_2} g_k$$

eingesetzt in (1): $(k+1) g_{k+1} \approx 2 g_k$

$$\Rightarrow \frac{g_{k+1}}{g_k} \approx \frac{2}{k+1} \Rightarrow g_{k+1} \approx \frac{2^{k+1}}{(k+1)!} g_0$$

$$g(s) = \sum_{k=0}^{\infty} g_k s^k$$

$$\Rightarrow g(s) \sim e^{2s}$$

$$f(s) \sim e^{2s}$$

Falls die Potenzreihen nicht abbrechen divergiert
 $G(s) = s^\lambda e^{-s} g(s) \sim e^s$ für $s \rightarrow \infty$ \downarrow
 Randbed!

\Rightarrow Daher Abbruch bei $k = n' \in \mathbb{N}_0$:

$$f_{n'+1} = 0, \quad g_{n'+1} = 0$$

Abbruchbedingung
 $\xrightarrow{2}$ eingesetzt

$$\bullet (1) \quad -g_{n'} - \frac{a_2}{a} f_{n'} = 0$$

$$(2) \quad -f_{n'} - \frac{a_1}{a} g_{n'} = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{a_2 f_{n'} = -a g_{n'}} \quad (1')$$

$$a f_{n'} = -a_1 g_{n'} \quad (1'')$$

$1'$ und $1''$
 (stimmen überein da

$$\frac{a_2}{a} = \frac{a}{a_1} \quad a = \sqrt{a_1 a_2}$$

$(1')$ in (3) für $k+1 = n'$:

$$\frac{a(\lambda + a + n') + \frac{a_2}{a} \mu}{a} = - \frac{a_2(\lambda - a + n') - \frac{a}{a_2} \mu}{a_2}$$

$$\lambda + a + n' + \frac{a_2}{a} \mu - \lambda - a + n' - \frac{a}{a_2} \mu = 0$$

$$2a(\lambda + n') = \left(\frac{a^2}{a_2} - a_2 \right) \mu = \frac{2E}{\hbar c} \mu$$

quadriert: $\underbrace{a^2 (\lambda + n')^2}_{m_0^2 c^4 - E^2} = \frac{E^2}{(\hbar c)^2} \mu^2$

$$\frac{m_0^2 c^4 - E^2}{(\hbar c)^2}$$

$$\Rightarrow (m_0^2 c^4 - E^2) (\lambda + n')^2 = E^2 \gamma^2$$

Feinstruktur-
formel

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{\gamma}{\lambda + n'}\right)^2}}$$

$$E(j, l, n')$$

exakte Energie-Eigenwerte!

$$\lambda = \sqrt{q^2 - \gamma^2} \\ = \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - \gamma^2}$$

$$(j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots \\ j = l \pm \frac{1}{2})$$

$$\gamma \approx \frac{1}{137} \text{ Feinstruktur} \\ \text{konstante}$$

$$\gamma = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}$$

Entwicklung nach der Feinstrukturkonstante bis $O(\gamma^4)$

$$E = m_0 c^2 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\gamma}{n' + \lambda}\right)^2 + \frac{3}{8} \left(\frac{\gamma}{n' + \lambda}\right)^4 + O(\gamma^6) \right]$$

$$\lambda(\gamma) = |q| \sqrt{1 - \left(\frac{\gamma}{q}\right)^2} = |q| \cdot \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\gamma}{q}\right)^2 + O(\gamma^4) \right]$$

$$\frac{1}{(n' + \lambda)^2} = \frac{1}{(n' + |q| - \frac{\gamma^2}{2|q|})^2} + O(\gamma^4)$$

$$= \frac{1}{n^2} \left(1 - \frac{\gamma^2}{2|q|n} \right)^{-2} + O(\gamma^4)$$

$$= \frac{1}{n^2} \left(1 + \frac{\gamma^2}{|q| \cdot n} \right) + O(\gamma^4)$$

$$= \frac{1}{n^2} + \frac{\gamma^2}{|q| n^3} + O(\gamma^4)$$

$$n := n' + |q|$$

$$n' = 0, 1, 2, \dots$$

$$|q| = j + \frac{1}{2} = 1, 2, \dots$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Eingesetzt in E:

$$E = m_0 c^2 \left[\underbrace{1}_{\text{Ruheenergie}} - \underbrace{\frac{\gamma^2}{2n^2}}_B - \underbrace{\frac{\gamma^4}{2n^3} \left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right)}_C \right] + O(\gamma^6)$$

Diskussion: B : $O(\gamma^2)$: $\Delta E^{(2)} = -m_0 c^2 \frac{\gamma^2}{2n^2} = -\frac{R_H}{n^2}$

nicht relativistisches
Energiespektrum
(entartet)

C : $O(\gamma^4)$: $\Delta E^{(4)} = -m_0 c^2 \frac{\gamma^4}{2n^3} \left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right)$

Feinstruktur aufspaltung
(Aufhebung der j-
Entartung)

• kann man auch durch
Störungstheorie + Schrödingergleichung erhalten

- Spin-Kopplung
- verändert die Masse
- Zitterbewegung des Elektrons

eingesamt wird.

Spektroskop. Bezeichnung der Feinstrukturterme: $\boxed{n l_j}$

$n=1$ $j=\frac{1}{2}$: $1S_{1/2}$ ($l=0$)

$$n=2 \quad j = \frac{1}{2} : 2s_{1/2} \quad 2p_{1/2} \quad (n'=1)$$

$$j = \frac{3}{2} : \quad \quad \quad 2p_{3/2} \quad (n'=0)$$

