English Summary:

Dirac eq. $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = (c\underline{\alpha}\cdot\underline{p} + m_0c^2\beta)\psi$ $\alpha^\mu = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^\mu \\ \sigma^\mu & 0 \end{pmatrix}$, $\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

probab. continuity eq. $\partial_k j^k = 0$ $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$ spinor

7.4 Nonrelativistic limit

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = (c\underline{\alpha}\cdot\underline{\Pi} + m_0c^2\beta + e\phi)\psi$ $\Pi := \underline{p} - e\underline{A}$, $\psi = \begin{pmatrix} \varphi_a \\ \varphi_b \end{pmatrix}$ $E>0$ particle, $E<0$ antipart.

nonrelativist.: $E - m_0c^2 \ll m_0c^2$, $e\phi \ll m_0c^2$ $\Rightarrow \boxed{i\hbar\dot{\varphi}_a = \left[\frac{1}{2m_0}(\underline{p} - e\underline{A})^2 - \frac{e\hbar}{2m_0}\underline{\sigma}\cdot\underline{B} + e\phi\right]\varphi_a}$

Pauli eq. $\varphi_a = \begin{pmatrix} \varphi_\uparrow \\ \varphi_\downarrow \end{pmatrix}$

7.5 H-Atom

Rotationssymm. Pot.: $H = c\underline{\alpha}\cdot\underline{p} + m_0c^2\beta + V(r)$

$$\left.\begin{aligned} p_r &:= \frac{1}{r}(\underline{r}\cdot\underline{p} - i\hbar) \\ \alpha_r &:= \frac{1}{r}\underline{\alpha}\cdot\underline{r} \\ \hbar Q &:= \beta(\underline{\tilde{\sigma}}\cdot\underline{L} + \hbar) \end{aligned}\right\} \text{ hermitesche Op.}$$

$$\Rightarrow \boxed{H = c\alpha_r p_r + \frac{ic}{r}\alpha_r\beta\hbar Q + m_0c^2\beta + V(r)}$$

Beweis: $\alpha_r p_r + \frac{i}{r}\alpha_r\beta\hbar Q = \alpha_r\left[\frac{1}{r}(\underline{r}\cdot\underline{p} - \cancel{i\hbar}) + \frac{i}{r}\underbrace{\beta^2}_{1}(\underline{\tilde{\sigma}}\cdot\underline{L} + \cancel{\hbar})\right]$

$$= \frac{\alpha_r}{r}(\underline{r}\cdot\underline{p} + i\underline{\tilde{\sigma}}\cdot\underline{L})$$

$$= \frac{1}{r^2}\left[(\underline{\alpha}\cdot\underline{r})(\underline{r}\cdot\underline{p}) + \underbrace{i(\underline{\alpha}\cdot\underline{r})(\underline{\tilde{\sigma}}\cdot\underline{L})}_{i(\underline{\alpha}\cdot\underline{r})(\underline{r}\cdot\underline{p}) - ir^2(\underline{\alpha}\cdot\underline{p})}\right]$$

$$= \underline{\alpha}\cdot\underline{p}$$

Es gilt $[\hbar Q, H] = 0$

$\Rightarrow$ es ex. gemeinsame Eigenzustände zu H, $\hbar Q$.

<u>Eigenwerte von $\hbar Q$:</u>

$$(\hbar Q)^2 = \beta(\tilde{\underline{\sigma}}\cdot\underline{L}+\hbar)\beta(\tilde{\underline{\sigma}}\cdot\underline{L}+\hbar) = \underbrace{\beta^2}_{1}(\tilde{\underline{\sigma}}\cdot\underline{L}+\hbar)^2 \qquad \text{denn } [\beta,\tilde{\underline{\sigma}}]=0$$

$$= \begin{pmatrix} [1,\underline{\sigma}] & 0 \\ 0 & -[1,\underline{\sigma}] \end{pmatrix}$$

$$= \underbrace{(\tilde{\underline{\sigma}}\cdot\underline{L})(\tilde{\underline{\sigma}}\cdot\underline{L})}_{L^2 + i\tilde{\underline{\sigma}}\underbrace{(\underline{L}\times\underline{L})}_{i\hbar\underline{L}}} + 2\hbar\tilde{\underline{\sigma}}\underline{L} + \hbar^2$$

$$= L^2 + \hbar(\tilde{\underline{\sigma}}\cdot\underline{L}) + \hbar^2 = \overbrace{\left(\underline{L}+\frac{\hbar}{2}\tilde{\underline{\sigma}}\right)}^{\underline{J}}{}^2 + \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\text{denn } \left(\underline{L}+\frac{\hbar}{2}\tilde{\underline{\sigma}}\right)^2 = L^2 + \hbar(\tilde{\underline{\sigma}}\cdot\underline{L}) + \frac{\hbar^2}{4}\underbrace{\tilde{\underline{\sigma}}^2}_{3}$$

$$\boxed{(\hbar Q)^2 = J^2 + \frac{\hbar^2}{4}}$$

J^2 hat die Eigenwerte $\hbar j(j+1)$ mit $j = l \pm s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots$

$$\Rightarrow (\hbar Q)^2 |j\rangle = \left(\hbar^2 j(j+1) + \frac{\hbar^2}{4}\right)|j\rangle = \hbar^2\underbrace{\left(j+\frac{1}{2}\right)^2}_{q^2}|j\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\hbar Q\,|j\rangle = \hbar q\,|j\rangle} \quad \text{mit } q = \pm 1, \pm 2, \ldots$$

Es bleibt das radiale Eigenwertproblem für:

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

<u>Geeignete Darstellung für α_r:</u>

$$(\alpha_r)^2 = \frac{1}{r^2}(\underline{\alpha}\cdot\underline{r})(\underline{\alpha}\cdot\underline{r}) = \frac{1}{r^2}\sum_{\mu,\nu=1}^{3}\alpha^\mu\alpha^\nu x^\mu x^\nu$$

$$= \frac{1}{2r^2} \sum_{\mu,\nu} \underbrace{(\alpha^\mu \alpha^\nu + \alpha^\nu \alpha^\mu)}_{2\,\delta^{\mu\nu}} x^\mu x^\nu$$

$$= \frac{1}{r^2} \underbrace{\sum_\mu x^\mu x^\mu}_{r^2} = 1$$

$$\alpha_r \beta + \beta \alpha_r = \frac{1}{r} \underbrace{(\underline{\alpha}\beta + \beta\underline{\alpha})}_{0} \underline{r} = 0$$

Für $\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ lässt sich dies durch die Darstellung

$$\alpha_r = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_r = \alpha_r^+ \quad \text{erfüllen:}$$

$$\alpha_r \beta = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta \alpha_r = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

Es gilt $p_r = \frac{1}{r}(\underbrace{\underline{r}.\underline{p}}_{\frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r}} - i\hbar) = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$

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

Ansatz für den Radialanteil: $\begin{pmatrix} \varphi_a \\ \varphi_b \end{pmatrix} \sim \frac{1}{r} \begin{pmatrix} F(r) \\ G(r) \end{pmatrix}$

eingesetzt in Eigenwertgl. für H:

$$H \begin{pmatrix} F/r \\ G/r \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} F/r \\ G/r \end{pmatrix}$$

$$-\frac{\hbar c}{r}\frac{dG}{dr} - \frac{c\hbar q}{r^2} G + \frac{m_0 c^2}{r} F + \frac{V}{r} F = E \frac{F}{r}$$

$$\frac{\hbar c}{r}\frac{dF}{dr} - \frac{c\hbar q}{r^2} F - \frac{m_0 c^2}{r} G + \frac{V}{r} G = E \frac{G}{r} \qquad \left(V = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}\right)$$

bzw.

$$(E - m_0 c^2 - V) F + \hbar c \frac{dG}{dr} + \frac{c\hbar q}{r} G = 0$$

$$(E + m_0 c^2 - V) G - \hbar c \frac{dF}{dr} + \frac{c\hbar q}{r} F = 0$$

Skalentransf.: $a_1 = \frac{m_0c^2 + E}{\hbar c}$, $a_2 = \frac{m_0c^2 - E}{\hbar c}$

$$a = \sqrt{a_1 a_2} = \frac{\sqrt{m_0^2c^4 - E^2}}{\hbar c}$$

$\varrho := ar$, $\gamma := \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ "Feinstrukturkonstante",

$$\frac{V}{\hbar c a} = -\frac{\gamma}{\varrho}$$

$$\left(\frac{d}{d\varrho} + \frac{q}{\varrho}\right)G - \left(\frac{a_2}{a} - \frac{\gamma}{\varrho}\right)F = 0$$

$$\left(\frac{d}{d\varrho} - \frac{q}{\varrho}\right)F - \left(\frac{a_1}{a} + \frac{\gamma}{\varrho}\right)G = 0$$

Randbed.: $F(\varrho)$, $G(\varrho)$ regulär bei $\varrho \to 0$

$\to 0$ für $\varrho \to \infty$

Betrachte $|E| < m_0c^2 \Rightarrow a_1, a_2 > 0$, $a \in \mathbb{R}$

gebundene Zustände

Asymptot. Verhalten:

$$\varrho \to \infty \Rightarrow \left.\begin{aligned} G' &= \frac{a_2}{a}F \\ F' &= \frac{a_1}{a}G \end{aligned}\right\} \Rightarrow \begin{aligned} G'' &= G \Rightarrow G \sim e^{-\varrho} \\ F'' &= F \Rightarrow F \sim e^{-\varrho} \end{aligned}$$

($e^{+\varrho}$ divergiert!)

$$\varrho \to 0 \Rightarrow G' + \frac{q}{\varrho}G + \frac{\gamma}{\varrho}F = 0$$

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

Ansatz: $F(\varrho) = f_0\varrho^\lambda$, $G(\varrho) = g_0\varrho^\lambda$

$$\Rightarrow (\lambda + q)g_0 + \gamma f_0 = 0$$

$$(\lambda - q)f_0 - \gamma g_0 = 0$$

Nichttriviale Lösungen f_0, g_0 , falls

$$(\lambda+q)(\lambda-q)+\gamma^2 = \lambda^2-q^2+\gamma^2 \overset{!}{=} 0$$

$$\lambda = (\pm)\sqrt{q^2-\gamma^2} \quad \overset{!}{>} 0$$

regulär bei $\varrho \to 0$

<u>Ansatz</u>: $F(\varrho) = \varrho^\lambda e^{-\varrho} f(\varrho)$, $G(\varrho) = \varrho^\lambda e^{-\varrho} g(\varrho)$

$$\left.\begin{aligned} F(\varrho) &= \varrho^\lambda e^{-\varrho} f(\varrho) \\ G(\varrho) &= \varrho^\lambda e^{-\varrho} g(\varrho) \end{aligned}\right\} \quad \begin{aligned} & g' - g + \frac{\lambda+q}{\varrho} g - \left(\frac{a_2}{a} - \frac{\gamma}{\varrho}\right) f = 0 \\ & f' - f + \frac{\lambda-q}{\varrho} f - \left(\frac{a_1}{a} + \frac{\gamma}{\varrho}\right) g = 0 \end{aligned}$$

Lösung mit Potenzreihenansatz:

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

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

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

usw. für $g'(\varrho)$, $g(\varrho)/\varrho$

Koeffizientenvergleich:

<u>$O(\frac{1}{\varrho})$</u>: $(\lambda+q) g_0 + \gamma f_0 = 0$

$(\lambda-q) f_0 - \gamma g_0 = 0$ $\Rightarrow f_0, g_0$ (bis auf Norm. faktor)

<u>$O(\varrho^k)$</u>, $k=0,1,\dots$:

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

<u>Rekursion</u>!

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

Verhalten für <u>große k</u>: $a k g_{k+1} \approx a_2 k f_{k+1} \Rightarrow f_k \approx \frac{a}{a_2} g_k$

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

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

$$\Rightarrow g(\rho) \sim \exp(2\rho)$$

$$f(\rho) \sim \exp(2\rho)$$

Falls die Pot.reihen $g(\rho) = \sum_k g_k \rho^k$, $f(\rho) = \sum_k f_k \rho^k$ <u>nicht abbrechen</u>, divergiert $G_F(\rho) = \rho^\lambda e^{-\rho} g_f(\rho) \sim e^{+\rho}$ für $\rho \to \infty$

↯ Randbed.!

Daher <u>Abbruch</u> bei $k = n' \in \mathbb{N}_0$:

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

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

$$(2) \Rightarrow -f_{n'} - \frac{a_1}{a} g_{n'} = 0 \quad \Rightarrow a f_{n'} = -a_1 g_{n'}$$ stimmt mit (1') überein wegen $\frac{a_2}{a} = \frac{a}{a_1}$

(1') in (3) für $k+1 = n'$:

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

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

quadriert:

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

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

<u>Feinstrukturformel</u>

$\gamma \approx \frac{1}{137}$ Feinstrukturkonst.

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

exakte Energie-Eigenwerte $n' \in \mathbb{N}_0$ $\begin{pmatrix} j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots \\ j = l \pm s \end{pmatrix}$

<u>Entwicklung nach der Feinstrukturkonst. bis $O(\gamma^4)$</u>:

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

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

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

$$\boxed{n := n' + |q|}$$

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

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

$= l \pm s + \frac{1}{2}$

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

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

eingesetzt in E:

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

$n = 1, 2, 3, \dots$; $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, n - \frac{1}{2}$ (wegen $n = n' + j + \frac{1}{2}$)

$= l \pm s$

<u>Diskussion</u>:

$O(\gamma^0)$: $E = m_0 c^2$ Ruheenergie

$O(\gamma^2)$: $\Delta E^{(2)} = - m_0 c^2 \frac{\gamma^2}{2n^2} = - \frac{R_H}{n^2}$ nichtrelativist. Energiespektrum (entartet)

$O(\gamma^4)$: $\Delta E^{(4)} = - m_0 c^2 \frac{\gamma^4}{2n^3} \left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right)$ <u>Feinstruktur-Aufspaltung</u>

(Aufhebung der j-Entartung)

$2(2j+1)$-fache m_j-Entartung bleibt

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

$n=1 \qquad j=\frac{1}{2} \; : \; 1s_{1/2} \qquad\qquad\qquad (n'=0)$

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

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

...