

## 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  $\psi_{p\pm} \sim e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar} - i E_{\pm}(p)t/\hbar}$

Die 2  $E_{\pm}(p)$  - Zweige bilden die Dispersionsrelation,

Energie ist aber durch  $|E_{\pm}| > 0$

Beispiel: Pionen

neuer Freiheitsgrad: Ladung  $\pm, 0$

→ Teilchen - Antiteilchen Konzept

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

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

Die Fundamentallösungen sind Vektor-ebene Wellen;  
die den Spin freiheitsgrad enthalten:

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

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

Analogie zwisch Spin und Bahndarimpuls

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

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

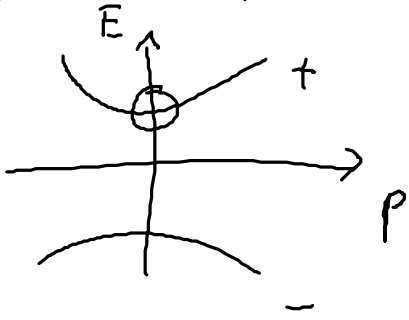
daher um Ph Diracsee eingeführt worden, um Zersfall

„reale“ Elektronen 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

$$-\frac{\frac{1}{2} q \rho_{\text{Kern}}(r)}{8m^2 c^2 \epsilon_0}, \quad \rho_{\text{Kern}}(r) : \text{Kernladungsdichte}$$

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

Kontaktterm wegen Produkt  $\neq 0$

"Elektron im Kontakt mit Kern"

Nachtrag: kommt in der Entwicklung der Diracgleichung als Term mit  $\underline{\underline{\partial_r \vec{\psi}_1}}$  (oben i im Vgl. zu  $\vec{p}$ )

ist nicht hermitisch!    Proble der Natur!

hermitisch machen des Terms:

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

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

Kugelkoordinaten, weil  ~~$\int d\varphi \int d\theta$~~  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.

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

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

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

- Spin - Bah - Kopplung

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

← prüfe die Faktoren

beschreibt eine Kopplung von Spin- und Drehimpulsfreiheitsgrad im Pauli-System des Elektrons wird die Bewegung des Protons über ein Magnetfeld wahrgenommen, diese wechselwirkt mit dem Spin des Elektrons

- Pauli-Gleichung beschreibt die Ankopplung des Elektrons an externe Felder  $(\vec{E}_{\text{ext}}, \vec{B}_{\text{ext}})$

→  $H_{\text{el}}, H_{\text{magn.}}$

geht bevor wir zur Lösung kommen: Hilfsmittel

### III. Näherungsverfahren und Hilfsmittel

#### 1. Dirac-Schreibweise der Quantentheorie

hier: einfache Notation finden

Schreibweise f. Basis im Hilbertraum und

f. Wellenfunktionen  $(\vec{\varphi})$   $(\vec{r}, \vec{s})$  durch Verwendung

von Quantenzahlen vereinfachen

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

Verbundquantenzahl, kein Tripel  $\rightarrow$

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

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

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

Diracbasis  $|u\rangle \hat{=} \varphi_u(\vec{r}, \vec{s}) \Rightarrow |p, \lambda, m_s\rangle = \overline{\varphi}_{p\lambda m_s}(\vec{r}, \vec{s})$

a) Notation einer Basis

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

b) Basis: Vollständigkeit, Orthogonalität usw

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

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

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

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

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

c) Aufpauere eine Funktion

$$\begin{aligned}\psi(r, t) &= \sum_n \underbrace{\int d^3r' \psi_n^*(r') \psi_n(r)}_{1 \text{ Element}} \psi(r, t) \\ &= \sum_n \underbrace{\int d^3r' \psi_n^*(r') \psi(r', t)}_{1 \text{ Element}} \psi_n(r)\end{aligned}$$

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

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.

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

an dieser Notation müssen Sie sich gewöhnen,

hat nur den Sinn bis zu Dinge schneller und  
über sichliches 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  
Einführung der Spinquantenzahl  $m_s$ ,

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

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

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

bis H-Atom ohne Spin-Bahn-Kopplung:

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

ist der vollständige Satz von Observablen



oh Spü - Bah - Kopplung

$$\vec{\Psi}_1 = |u, \underbrace{l, m_l}_{\dots m}, \underbrace{m_s}_{\dots} \rangle \quad |u, l, m_l, \underbrace{s, m_s}_{\nearrow \frac{1}{2}} \rangle$$

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

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

$$\underline{L}_3 |u, l, m_l, m_s \rangle = \hbar m_l |u, l, m_l, m_s \rangle$$

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

$$\hat{S}_3 |u, l, m_l, m_s \rangle = \hbar m_s |u, l, m_l, m_s \rangle$$

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

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

↑ ortabhängiger Vorfaktor

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

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

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 guter Quantenzahl mehr um  
Zustand zu charakterisieren

$$[\hat{s}_3, g(r) \vec{e} \cdot \vec{s}] = g(r) i\hbar (\hat{s}_2 e_1 - e_2 \hat{s}_1)$$

$$[e_3 + \hat{s}_3, H_{S-B}] = 0$$

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

$\rightarrow$  Einführung des Gesamt Drehimpulses  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

Man kann zeigen, daß

$$[J_3, H_0 + H_{S-B}] = 0 \quad (1)$$

$$[J^2, H_0 + H_{S-B}] = 0 \quad (2)$$

wird durch Rechnen gezeigt

1. Beziehung schon folgt, weil  $[H_0, \hat{s}_3] = 0$

$$[H_0, e_3] = 0 \rightarrow [H_0, J_3] = 0$$

$$[H_{S-B}, J_3] = 0$$

$\rightarrow J_3$  vertauscht mit  $H = H_0 + H_{S-B}$

2. Beziehung wird folgendermaßen gezeigt

$$J^2 = (\vec{l} + \vec{s})^2 = \vec{l}^2 + 2\vec{l} \cdot \vec{s} + \vec{s}^2$$

die se 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 kein 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 müsse 2 neue QZ eingeführt werden und zwar über die Eigenfunktionen des Gesamtdrehimpulses:

$$J^2 |n, l, s, j, m_j \rangle = \hbar^2 \lambda(j) |n, l, s, j, m_j \rangle$$

$$J_3 |n, l, s, j, m_j \rangle = \hbar m_j |n, l, s, j, m_j \rangle$$

diese Größen  $\lambda, m_j$  müsse ermittelt werden