Theoretische Physik: Fortgeschrittene Vielteilchentheorie, Übung 12

Prof. Dr. Hans Peter Büchler WS 2012/13, 15. Januar 2013

1. **Relativistische Korrekturen im Wasserstoff-Atom (Übungsstunde)**

   Wir wollen die Korrekturen, die man aus einer Entwicklung der relativistischen Theorie nach Potenzen von $\frac{v}{c}$ erhält für das Wasserstoff-Atom einzeln untersuchen. Die Entwicklung lautet

$$H = mc^2 + \underbrace{\frac{\mathbf{p^2}}{2m} + V(r)}_{H_0} \underbrace{-\frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2}}_{H_{\mathrm{kin}}} + \underbrace{\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}}_{H_{\mathrm{SB}}} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta V(r)}_{H_{\mathrm{D}}} + \dots$$

   wobei $V(r) = -e^2/r$ ist. Der erste Term ist durch die Ruhemasse des Elektrons gegeben und spielt in der Dynamik keine Rolle. H_0 ist der aus der nicht-relativistischen Theorie bekannte Hamilton-Operator des Wasserstoffatoms mit den Eigenzuständen $|nlm\rangle$, die wir im Folgenden als Ausgangspunkt für die Störungstheorie verwenden.

   a) Zeige, dass man den Term H_{kin} aus einer Entwicklung des (klassischen) Terms der kinetischen Energie $E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$ bekommt. Wir wollen den Term jetzt in erster Ordnung Störungstheorie behandeln. Die Zustände $|nlm\rangle$ sind bezüglich H_0 entartet, denn die Energie hängt nur von n ab. Zeige, dass wir dennoch die Störungstheorie für nicht-entartete Zustände anwenden können, indem du das Matrixelement $\langle H_{\mathrm{kin}}\rangle = \langle nlm|H_{\mathrm{kin}}|nlm\rangle$ in der Form

$$\langle H_{\mathrm{kin}}\rangle = -\frac{1}{2mc^2}\left[\left\langle H_0^2\right\rangle + e^2\left\langle H_0\frac{1}{r}\right\rangle + e^2\left\langle\frac{1}{r}H_0\right\rangle + e^4\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle\right]$$

   schreibst. Warum brauchen wir die entartete Störungstheorie nicht? Zeige, dass die auftretenden Matrixelemente der Form $\langle r^{-p}\rangle$ als

$$\left\langle r^{-p}\right\rangle = \int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^{2-p}\,|R_{nl}(r)|^2$$

   geschrieben werden können. Berechne die Energiekorrekturen für die *1s*, *2s* und *2p* Orbitale explizit (eventuell mithilfe eines CAS).

   b) Den Term H_{SB} haben wir bereits in Übung 4.1 ausführlich behandelt (beachte, dass wir hier der Einfachheit halber das CGS System mit $4\pi\epsilon_0 = 1$ verwenden). Gebe die Korrekturen für oben genannte Orbitale explizit an. Beachte für das *2p* Orbital die Aufspaltung der entarteten Zustände. Gebe die neuen Quantenzahlen für die Drehimpulskopplung an.

   c) Der Term H_{D} wird Darwin-Term genannt. Berechne auch für diesen Term die Korrekturen für die $n = 1$ und $n = 2$ Orbitale.

   d) Wir haben somit alle Korrekturen in niedrigster Ordnung berücksichtigt. Setze die entsprechenden Energiekorrekturen zu einer neuen Gesamtenergie für die Zustände $E = E_0 + E_{\text{kin}} + E_{\text{SB}} + E_{\text{D}}$ zusammen. Schreibe die Energien in Abhängigkeit von $\alpha = e^2/\hbar c$ und der Ruhe-Energie mc^2. In der nicht-relativistischen Theorie ist der $n = 1$ Zustand 2x und der $n = 2$ Zustand 8x entartet. Wie stellt sich die Entartung in der relativistischen Theorie dar? Von welchen Quantenzahlen ist die Energie abhängig?

2. Kleinsches Paradoxon (Schriftlich)

Wir betrachten die Streuung eines Elektrons der Energie E und Impuls $\mathbf{p} = p\mathbf{e_z}$ mit $p_z > 0$ an einer Potentialstufe in der relativistischen Theorie der Dirac-Gleichung. Das 1D Stufen-Potential sei beschrieben durch

$$V(z) = e \cdot \phi(z) = e \cdot \phi_0\, \theta(z) \qquad \text{mit } \theta(z) = \begin{cases} 0 & z \leq 0 \\ 1 & z > 0 \end{cases}$$

wobei e die Elementarladung und $\phi_0 > 0$ das Potential für $z > 0$ ist. Nach dem Minimalkopplungs-Prinzip erhalten wir die Dirac-Gleichung für ein Elektron im elektromagnetischen Potential $A_\mu = (\phi(z)/c, 0, 0, 0)^t$ als

$$i\hbar\partial_t\Psi = \big(V(z) + mc^2\beta + c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p}\big)\,\Psi$$

(a) Finde eine stationäre Lösung der Dirac-Gleichung der Form

$$\Psi(z,t) = \mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\,\Psi(z) \qquad \text{mit } \Psi(z) = \begin{cases} \Psi_{\mathrm{i}}(z) + \Psi_{\mathrm{r}}(z) & z \leq 0 \\ \Psi_{\mathrm{t}}(z) & z > 0 \end{cases},$$

wobei die zeitunabhängigen Spinoren entsprechend die ei̲nlaufende, r̲eflektierte und t̲ransmittierte Welle bezeichnen. Verwende für die einzelnen Beiträge die bekannten Lösungen für freie Teilchen mit entsprechendem Impuls:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathrm{i}}(z) &= c_{\mathrm{i}}\,\tilde{u}(\mathbf{p},\uparrow)\,\mathrm{e}^{ipz/\hbar} \\ \psi_{\mathrm{r}}(z) &= c_{\mathrm{r}}\,\tilde{u}(-\mathbf{p},\uparrow)\,\mathrm{e}^{-ipz/\hbar} \\ \psi_{\mathrm{t}}(z) &= c_{\mathrm{t}}\,\tilde{u}(\mathbf{p}',\uparrow)\,\mathrm{e}^{ip'z/\hbar} \end{aligned}$$

mit

$$\tilde{u}(\mathbf{p},s) = \begin{pmatrix} \chi^{(s)} \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}}{E_p + mc^2}\chi^{(s)} \end{pmatrix} \qquad \chi^{(\uparrow)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \chi^{(\downarrow)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

und Koeffizienten $c_i \in \mathbb{C}$.

(b) Bestimme den Impuls p' in Abhängigkeit von p. Am Punkt $z = 0$ muss $\Psi(z)$ stetig sein (warum fordern wir keine Stetigkeitsbeziehungen für die Ableitung?). Leite daraus Beziehungen zwischen den Koeffizienten $c_{\mathrm{i}}, c_{\mathrm{r}}$ und c_{t} her.

(c) Berechne nun die einfallende (j_i), reflektierte (j_r) und transmitierte (j_t) Stromdichte. Der Stromdichte-Operator ist im Dirac-Formalismus durch $j^\mu = c\,\overline{\Psi}\gamma^\mu\Psi$ gegeben. Diskutiere die drei Fälle:

  (1) $E - e\phi_0 > mc^2$

  (2) $-mc^2 < E - e\phi_0 < mc^2$

  (3) $E - e\phi_0 < -mc^2$

(d) Zeige, dass im Fall (3) der Reflexions-Koeffizient $R \equiv |j_\mathrm{r}/j_\mathrm{i}|$ größer als eins ist, d.h. es werden mehr Teilchen reflektiert als überhaupt einfallen.

Dieser Sachverhalt wird als Kleinsches Paradoxon bezeichnet und ist ein Beispiel dafür, dass in der relativistischen Quantenmechanik Teilchen/Antiteilchen-Paare erzeugt werden können. Im Einteilchenbild des Dirac-Formalismus kostet diese Erzeugung von Teilchen keine Energie. Aus der Relativitätstheorie würde man aber erwarten, dass für ein solchen Prozess die Energie $2mc^2$ aufgebracht werden muss. Diese Ungereimtheit ist ein Zeichen dafür, dass in der relativistischen Quantenmechanik das Einteilchen-Konzept zusammenbricht und mithilfe der relativistischen Quantenfeldtheorie gelöst werden muss.