

# Theoretische Physik: Fortgeschrittene Quantentheorie, Übung 7

---

Prof. Dr. Alejandro Muramatsu WS 2014/15, 04. Dezember 2014

## 1. Lösungen der Dirac-Gleichung

- a) Finde die Lösungen der Dirac-Gleichung für freie massive Teilchen in einem allgemeinen Bezugssystem.

*Hinweis:* Da in der Vorlesung bereits gezeigt wurde, dass die Lösungen der Dirac-Gleichung in einem Bezugssystem in dem das Teilchen ruht, positive und negative Energien besitzen, kann man allgemein Lösungen der Dirac-Gleichung für beide Fälle einführen:

$$\begin{aligned}\psi^{(+)} &= \exp(-ik_{\mu}x^{\mu})u(k) \quad (\text{positive Energien}), \\ \psi^{(-)} &= \exp(+ik_{\mu}x^{\mu})v(k) \quad (\text{negative Energien}).\end{aligned}$$

Mit dieser Form der Lösungen ist  $k_0 > 0$ . Die Lösungen der Dirac-Gleichung sollen folgendes erfüllen:

$$(k_{\mu}\gamma^{\mu} - m)u(k) = 0 \quad (\text{positive Energien}), \quad (1)$$

$$(k_{\mu}\gamma^{\mu} + m)v(k) = 0 \quad (\text{negative Energien}). \quad (2)$$

Um diese Teilaufgabe zu lösen, kann man die Gleichungen (1) und (2) verwenden, zusammen mit der Kenntnis der Lösungen im Fall des ruhenden Teilchens und mit der Tatsache, dass folgendes gilt:

$$(k_{\mu}\gamma^{\mu} - m)(k_{\mu}\gamma^{\mu} + m) = k_{\mu}k^{\mu} - m^2 = 0.$$

- b) Normiere die Lösungen so, dass folgendes gilt:

$$\begin{aligned}\tilde{u}^{(\alpha)}(k)u^{(\beta)}(k) &= \delta_{\alpha\beta}, & \tilde{u}^{(\alpha)}(k)v^{(\beta)}(k) &= 0 \\ \tilde{v}^{(\alpha)}(k)v^{(\beta)}(k) &= -\delta_{\alpha\beta}, & \tilde{v}^{(\alpha)}(k)u^{(\beta)}(k) &= 0.\end{aligned}$$

## 2. Spin-Bahn-Kopplung und Clebsch-Gordon-Koeffizienten

Aus der relativistischen Beschreibung des Wasserstoff-Problems mithilfe der Dirac-Gleichung kann man Korrekturen zum nicht-relativistischen Hamilton-Operator  $H_0$  ableiten (siehe Aufgabe 3). Eine wichtige Korrektur ist die sogenannte  $\vec{L}\vec{S}$ - oder Spin-Bahn-Kopplung, die in einem einfachen Bild verstanden werden kann als Wechselwirkung des Elektronenspins  $\vec{S}$  mit dem von der Bahnbewegung des Elektrons erzeugten Magnetfelds  $\vec{B} \sim \vec{L}$ . Die korrekte relativistische Rechnung liefert folgenden Beitrag zum Wasserstoff Hamilton-Operator:

$$H_{\text{SB}} = f(r) \vec{L}\vec{S} = \sum_i f(r) L_i \otimes S_i$$

wobei  $f(r) = e^2/(2m_e^2 c^2 r^3 4\pi\epsilon_0)$ . Anstelle einer getrennten Behandlung von Spin und Bahndrehimpuls mit den Operatoren  $\vec{S}^2$ ,  $S_z$ ,  $\vec{L}^2$ ,  $L_z$ , können wir den Gesamtspin  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} = \vec{L} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \vec{S}$  einführen, um der Kopplung der beiden gerecht zu werden. Der Gesamtdrehimpuls  $\vec{J}$  ist wieder ein Drehimpuls, denn er erfüllt  $[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$ .

- Zeige, dass alle Kommutatoren von je zweien der Operatoren  $\vec{J}^2$  mit  $\vec{L}^2$ ,  $\vec{S}^2$  und  $J_z$  verschwinden. Wir können somit eine gemeinsame Basis  $|l, s, j, m_j\rangle$  für diese Vektoren finden. Drücke  $H_{\text{SB}}$  durch die genannten vier Operatoren aus und zeige, dass dieser Term in der neuen Basis diagonal ist.
- Berechne nun für den Unterraum mit  $l = 1$  die Eigenzustände  $|l, s, j, m_j\rangle$  als Linearkombinationen der (alten) Zustände  $|l, s, m_l, m_s\rangle \equiv |l = 1, m_l\rangle \otimes |s = 1/2, m_s\rangle$ :

$$|l, s, j, m_j\rangle = \sum_{m_l, m_s} c(m_l, m_s, j, m) |l, s, m_l, m_s\rangle$$

Die Faktoren  $c(m_l, m_s, j, m)$  heissen Clebsch-Gordon-Koeffizienten.

**Tip:** Zeige zunächst, dass  $J_z$  bereits in der alten Basis diagonal ist. Bestimme nun das "höchste Gewicht", d.h. jenen Zustand zu  $j = l + s = 3/2$  und  $m = 3/2$ . Die weiteren  $j = 3/2$  Zustände können durch Anwendung der Leiteroperatoren  $J^\pm = J_x \pm iJ_y$  mit der Wirkung

$$J^+ |j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle$$

$$J^- |j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle$$

erzeugt werden. Durch Ausnutzung von Orthogonalität und Normierung der neuen Basis-Zustände findet man die noch fehlenden  $j = 1/2$  Zustände. Verwende eine vereinfachte Schreibweise der Zustände, in welcher die Quantenzahlen  $l$  und  $s$  nicht mehr explizit angegeben werden.

Das angegebene Verfahren lässt sich für beliebige Drehimpulse bzw. Spins verallgemeinern. Im Allgemeinen gilt dann für die Quantenzahl  $j$  des neuen Gesamtspins  $|l - s| < j < |l + s|$ .

### 3. Relativistische Korrekturen im Wasserstoff-Atom

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

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

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  $H_{\text{kin}}$  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  $\langle H_{\text{kin}} \rangle = \langle nlm | H_{\text{kin}} | nlm \rangle$  in der Form

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

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

$$\langle r^{-p} \rangle = \int_0^\infty dr r^{2-p} |R_{nl}(r)|^2$$

geschrieben werden können. Berechne die Energiekorrekturen für die  $1s$ ,  $2s$  und  $2p$  Orbitale explizit.

- b) Den Term  $H_{\text{SB}}$  haben wir bereits in Aufgabe 2 vorgestellt (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  $H_{\text{D}}$  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? Vergleiche das Ergebnis mit der allgemeinen Formel für die Elektronenzustände mit relativistischen Korrekturen,

$$E_{n,j} = E_n \left[ 1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n} \left( \frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right],$$

in der  $E_n$  die Energie des Elektrons im nicht-relativistischen Fall bezeichnet.