

bilineare Formen

(Beweis $\rightarrow$ Ü.A.)

(i) Skalar	$\bar{\psi} \psi$
(ii) Pseudoskalar	$\bar{\psi} \gamma_5 \psi$
(iii) Vektor	$\bar{\psi} \gamma^\mu \psi$
(iv) Axialer-Vektor (Pseudovektor)	$\bar{\psi} \gamma_5 \gamma^\mu \psi$
(v) Tensor 2. Stufe	$\bar{\psi} \sigma^{\mu\nu} \psi$

26.06.

IV. 7. Lösungen der Dirac-Gleichung für einfache Probleme

(A) Ebene Wellen aus Lorentztransformation

Dirac-Teilchen in Ruhe

$$\psi(\vec{r}, t) = \omega_{(0)}^r e^{-i \epsilon_r m_0 c^2 t / \hbar} \quad r = 1, 2, 3, 4$$

$$\epsilon_{1,2} = +1$$

$$\epsilon_{3,4} = -1$$

$$\underbrace{\omega_{10}^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \omega_{10}^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \omega_{10}^3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \omega_{10}^4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}}_{\text{Elektronen}}$$

Lorentz-Transformation in Inertialsystem mit $\vec{v}$

$$S(-\vec{v}) = e^{-\frac{\vec{v}}{2c} \vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}}$$

$$= \sqrt{\frac{E + m_0 c^2}{2m_0 c^2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \frac{p_z c}{E + m_0 c^2} & \frac{p_- c}{E + m_0 c^2} \\ 0 & 1 & \frac{p_+ c}{E + m_0 c^2} & \frac{-p_z c}{E + m_0 c^2} \\ \frac{p_z c}{E + m_0 c^2} & \frac{p_- c}{E + m_0 c^2} & 1 & 0 \\ \frac{p_+ c}{E + m_0 c^2} & \frac{-p_z c}{E + m_0 c^2} & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

wobei $p_{\pm} \equiv p_x \pm i p_y$

und

$$e^{-\frac{\vec{v}}{2c} \vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}} = 1 - \frac{\vec{v}}{2c} \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}}{v} + \frac{1}{2} \frac{v^2}{4c^2} \frac{(\vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma})^2}{v^2} - \frac{1}{6} \frac{v^3}{8c^3} \frac{(\vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma})^3}{v^3} + \dots$$

mit $(\vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma})^2 = \alpha^i \alpha^j \sigma_i \sigma_j = g^0 g^i g^0 g^j \sigma_i \sigma_j$

$$= -g^i g^j \sigma_i \sigma_j = -\frac{1}{2} (g^i g^j \sigma_i \sigma_j + g^j g^i \sigma_j \sigma_i)$$

$$= -\frac{1}{2} (2 g^{ij} \sigma_i \sigma_j) = v^2 \mathbb{1}$$

d.h.

$$S = 1 \cosh \frac{v}{2c} + \frac{\vec{L} \cdot \vec{v}}{v} \sinh \frac{v}{2c}$$

sowie:

$$\frac{\vec{L} \cdot \vec{v}}{v} = \alpha_x \frac{v_x}{v} + \alpha_y \frac{v_y}{v} + \alpha_z \frac{v_z}{v}$$

$$= \frac{p_x}{p} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} + \frac{i p_y}{p} \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} + \frac{p_z}{p} \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{p} \begin{bmatrix} 0 & p_z & p_- \\ p_z & p_- & 0 \\ p_+ & -p_z & 0 \end{bmatrix}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \omega^r(\vec{p}) &= S\left(\frac{-\vec{p}}{E}\right) \omega^r(0) \\ \psi^r(\vec{r}, t) &= \omega^r(\vec{p}) e^{-i E_r (p_\mu x^\mu / \hbar)} \end{aligned}$$

allg. Lösg.
für freies
Teilchen

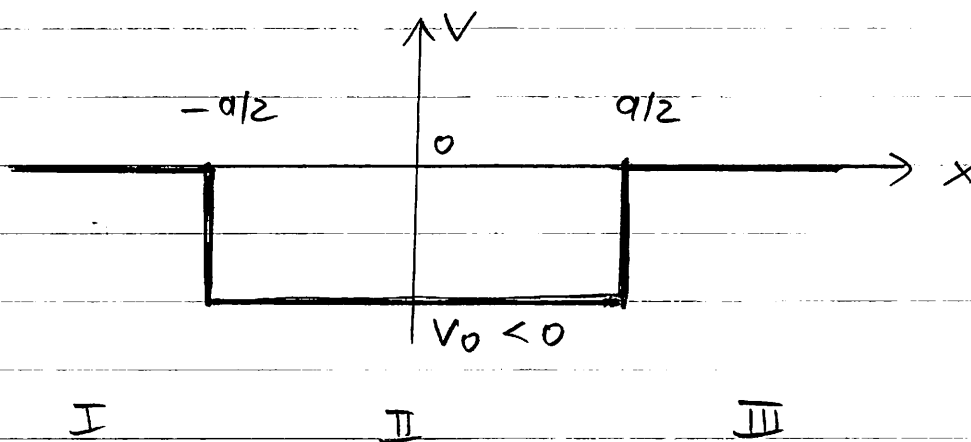
die $\omega^r(\vec{p})$ genügen den algebraischen Gleichungen
($\not{p}$ nicht $\hat{p}$!) "Dirac-Gleichung im Impulsraum"

$$\begin{aligned} (\not{p} - E_r m_0 c) \omega^r(\vec{p}) &= 0 \\ \omega^r(\vec{p}) (\not{p} - E_r m_0 c) &= 0 \end{aligned}$$

$$\psi(\vec{r}, t) = C_1(\vec{r}, t) \omega^1(0) + C_2(\vec{r}, t) \omega^2(0) \\ + C_3(\vec{r}, t) \omega^3(0) + C_4(\vec{r}, t) \omega^4(0)$$

Grund: $\psi(\vec{r}, t=0)$ hat Komponenten
mit $d(\vec{p}, s) \neq 0$

(B) 1-dim. Dirac Gleichung in endlichem Potentialtopf



stationäre Lösungen $\psi = \varphi e^{-iEt/\hbar}$
von $-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (c\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) + cA_0 + \beta m_0 c^2) \psi$
(I, III)

$$(c\alpha_x p_x + \beta m_0 c^2) \varphi = E \varphi$$

Lösung (Spin polarisation + z)

$$\varphi_{I,III}(x) = A_{I,III} e^{i \frac{k_1 x}{\hbar}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{k_1 c}{E + m_0 c^2} \\ 0 \end{pmatrix} + B_{I,III} e^{-i \frac{k_1 x}{\hbar}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{-k_1 c}{E + m_0 c^2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$k_1^2 = \frac{E^2}{c^2} - m_0^2 c^2$$

(II)

$$(C \alpha_x p_x + \beta m_0 c^2) \varphi = (E - V_0) \varphi$$

Lösung: (Spinpolarisation + z)

$$\varphi_{II}(x) = A_{II} e^{\frac{i k_z x}{\hbar}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{k_z c}{E - V_0 + m_0 c^2} \\ 0 \end{pmatrix} + B_{II} e^{-\frac{i k_z x}{\hbar}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{-k_z c}{E - V_0 + m_0 c^2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$k_z^2 = \frac{(E - V_0)^2 - m_0^2 c^4}{c^2}$$

Übergangsbedingungen

$\partial_\mu j^\mu = 0 \Rightarrow$ Wellenfunktionen stetig

$$\left. \begin{aligned} \varphi_I(-\frac{a}{2}) &= \varphi_{II}(-\frac{a}{2}) \\ \varphi_{II}(\frac{a}{2}) &= \varphi_{III}(\frac{a}{2}) \end{aligned} \right\} \begin{aligned} &\text{zwei 2-komponentige} \\ &\text{Gleichungen} \\ &\hat{=} 4 \text{ Gleichungen} \end{aligned}$$

$$\int d^3 \vec{r} \varphi^\dagger(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) = 1 \quad 1 \text{ Gleichung}$$

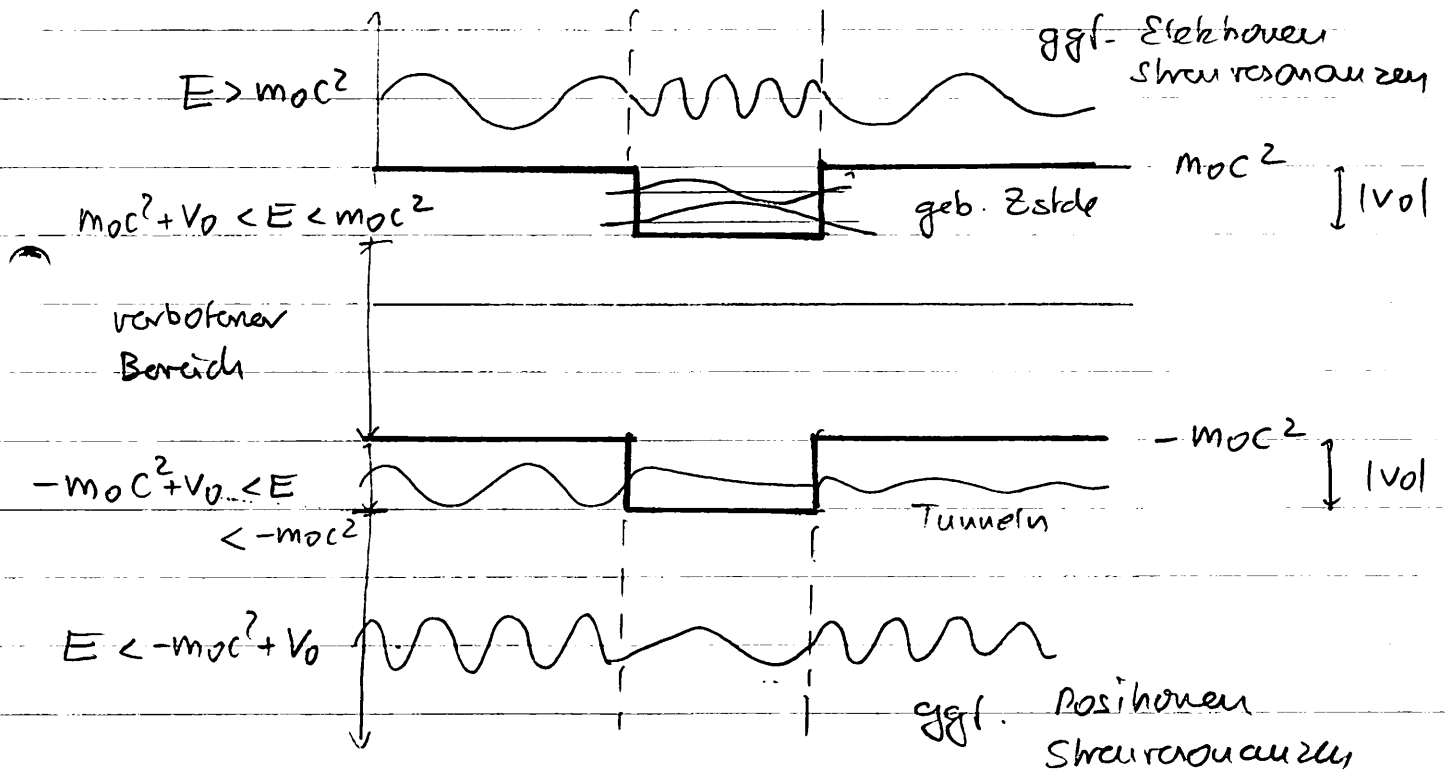
gebundene Zustände

$$\varphi_I(x \rightarrow -\infty) \rightarrow 0 \quad \varphi_{III}(x \rightarrow +\infty) \rightarrow 0$$

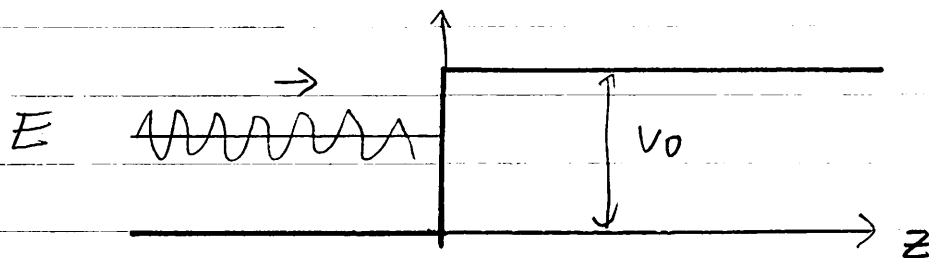
2 Bedingungen

gebundene Zustände $\Rightarrow$ nur diskrete E-Werte erlaubt

qualitative Diskussion der Lösungen $|V_0| < 2m_0c^2$



(C) Das Kleinsche Paradoxon



$$m_0c^2 < E < m_0c^2 + V_0$$

I

II

- stationäre Dirac - Gleichung

$$\underline{\text{I}} \quad \psi_{\text{I}} = \psi_{\text{I}}^e + \psi_{\text{I}}^r \\ = \phi_e e^{\frac{i}{\hbar}(pz - Et)} + \phi_r e^{\frac{i}{\hbar}(-pz - Et)}$$

$$\left(\frac{E}{c} - \beta m_0 c\right) \psi_{\text{I}}^e + i\hbar \alpha_z \frac{\partial \psi_{\text{I}}^e}{\partial z} = 0$$

$$(*) \quad \left(\frac{E}{c} - \alpha_z p - \beta m_0 c\right) \phi_e = 0$$

$$\frac{E^2}{c^2} = p^2 + m_0^2 c^2$$

$$\underline{\text{II}} \quad \psi_{\text{II}} = \phi_t e^{\frac{i}{\hbar}(\tilde{p}z - Et)}$$

$$\left(\frac{E - V_0}{c} - \beta m_0 c\right) \psi_{\text{II}} + i\hbar \alpha_z \frac{\partial \psi_{\text{II}}}{\partial z} = 0$$

$$\left(\frac{E - V_0}{c} - \alpha_z \tilde{p} - \beta m_0 c\right) \phi_t = 0$$

$$\frac{(E - V_0)^2}{c^2} = \tilde{p}^2 + m_0^2 c^2$$

$\tilde{p}$ reell

$V_0 \leq E - m_0 c^2$
(oder $V_0 \geq E + m_0 c^2$)

- Übergangsbedingung bei $z=0$

$$\phi_e + \phi_r = \phi_t$$

$$(*) \Rightarrow \left(\frac{E}{c} - \beta m_0 c - \alpha_z p\right) \phi_e = 0 = \left(\frac{E}{c} - \beta m_0 c + \alpha_z p\right) \phi_r$$

$$\left(\frac{E}{c} - \beta m_0 c\right)(\phi_e + \phi_r) = \alpha_z p (\phi_e - \phi_r)$$

$$(**) \Rightarrow \left(\frac{E}{c} - \beta m_0 c \right) \phi_t = \left(\frac{V_0}{c} + \alpha_z \tilde{p} \right) \phi_t$$

$$\left(\frac{E}{c} - \beta m_0 c \right) (\phi_e + \phi_r) = \left(\frac{V_0}{c} + \alpha_z \tilde{p} \right) (\phi_e + \phi_r)$$

$\Rightarrow$

$$\left(\frac{V_0}{c} + \alpha_z \tilde{p} \right) (\phi_e + \phi_r) = \alpha_p (\phi_e - \phi_r)$$

$$\left(\frac{V_0}{c} - \alpha_z (p + \tilde{p}) \right) \cdot \left[\frac{V_0}{c} + \alpha_z (p + \tilde{p}) \right] \phi_r = - \left[\frac{V_0}{c} - \alpha_z (p - \tilde{p}) \right] \phi_e$$

$$\phi_r = \frac{\frac{2V_0}{c} \left(-\frac{E}{c} + \alpha_z p \right)}{V_0^2/c^2 - (p + \tilde{p})^2} = r \phi_e$$

$$\phi_r^+ \phi_r = \left(\frac{2V_0/c}{V_0^2/c^2 - (p + \tilde{p})^2} \right)^2 \phi_e^+ \left(-\frac{E}{c} + \alpha_z p \right)^2 \phi_e$$

benötigen $\phi_e^+ \alpha_z \phi_e$

$$\phi_e^+ \alpha_z \cdot \left(\frac{E}{c} - \alpha_z p - \beta m_0 c \right) \phi_e = 0$$

$$\Rightarrow \frac{E}{c} \phi_e^+ \alpha_z \phi_e - \phi_e^+ \phi_e p - \phi_e^+ \alpha_z \beta m_0 c \phi_e = 0$$

$$\alpha_z \phi_e \mid \phi_e^+ \left(\frac{E}{c} - \alpha_z p - \beta m_0 c \right) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{E}{c} \phi_e^+ \alpha_z \phi_e - \phi_e^+ \phi_e p - \phi_e^+ \beta \alpha_z m_0 c \phi_e = 0$$

$$\Rightarrow \phi_e^+ \alpha_z \phi_e = \frac{pc}{E} \phi_e^+ \phi_e$$

damit

$$\phi_r^\dagger \phi_r = \left(\frac{2V_0/c}{V_0^2/c^2 - (p + \tilde{p})^2} \right)^2 \left\{ \underbrace{\left(\frac{E^2}{c^2} + p^2 \right) - 2p^2}_{\frac{E^2}{c^2} - p^2 = m_0^2 c^2} \right\} \phi_e^\dagger \phi_e$$

$$\phi_r^\dagger \phi_r = \left(\frac{2V_0 m_0}{V_0^2/c^2 - (p + \tilde{p})^2} \right)^2 \phi_e^\dagger \phi_e = R \phi_e^\dagger \phi_e$$

• Reflexionskoeffizient

$$R = \left(\frac{2V_0 m_0}{V_0^2/c^2 - (p + \tilde{p})^2} \right)^2$$

$$V_0 = 0 \Rightarrow R = 0$$

$$V_0 = E - m_0 c^2 \Rightarrow R = 1$$

• was passiert für $V_0 > E - m_0 c^2$?

$$\tilde{p}^2 = p^2 - \frac{V_0(2E - V_0)}{c^2} \quad E = \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4}$$

$\tilde{p}$ wird imaginär, d.h. $\tilde{p} = i\hbar\mu$

$$(i) \quad \underline{E + m_0 c^2 > V_0 > E - m_0 c^2}$$

Ansatz

$$\psi_{II} = \phi_t \exp(-\mu z - \frac{iE}{\hbar} t)$$

liefert

$$\underline{R = 1}$$

$\tilde{p}$ wird jedoch wieder reell für

(ii) $V_0 > E + m_0 c^2$

$R < 1$

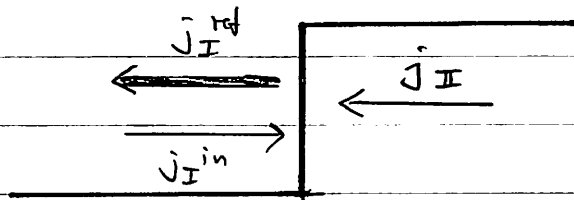


Transmission im
verbotenen Bereich

Kleinsches Paradoxon

Ü.A.: Ströme von einfallender, reflektierter
und transmittierter Welle für $V_0 > E + m_0 c^2$

$$|j_I^{\text{ref}}| > |j_I^{\text{in}}| \text{ und } j_{II} < 0$$



$$V_0 > E + m_0 c^2$$

Bem.: Rechnungen von Sauter (1931) zeigen
daß für eine ausgeschmiedete Potentialstufe
der Breite

$$d \gg \lambda_c = \frac{\hbar}{m_0 c}$$

keine Transmission auftritt

IV. 8. Das relativistische Wasserstoffatom

(A) Stationäre Lösungen der Dirac-Gleichung im Zentralpotential

$$\hat{H} \psi = (c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_0 c^2 + V(r)) \psi = E \psi$$

mit: $V(r) = e A_0(r) = -\frac{Ze}{r}$

Erhaltungsgrößen:

$$\begin{array}{ll} \vec{J} = \vec{L} + \vec{S} & \text{Gesamtdrehimpuls} \\ \hat{P} & \text{Parität} \end{array}$$

Ansatz:

$$\psi \rightarrow \psi_{jm} = \begin{pmatrix} \psi_{jm}(\vec{r}, t) \\ \chi_{jm}(\vec{r}, t) \end{pmatrix}$$

jetzt: ausnutzen, daß $[\vec{P}, \hat{H}] = 0$

zur Erinnerung: Raumspiegelung $\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = -\vec{r}$

Def: $\hat{P}_0 f(\vec{r}) = f(-\vec{r})$

$$\begin{aligned}\psi'(\vec{r}') &= \hat{P} \psi(\vec{r}) = e^{i\varphi} \gamma^0 \psi(\vec{r}) \\ &= e^{i\varphi} \gamma^0 \psi(-\vec{r}') = e^{i\varphi} \gamma^0 \hat{P}_0 \psi(\vec{r}')\end{aligned}$$

Paritätseigenzustände

$$\psi'(\vec{r}') = \lambda \psi(\vec{r}') \quad |\lambda| = 1$$

⇒ für Eigenzustände ψ_{jm} :

$$e^{i\varphi} \gamma^0 \hat{P}_0 \psi_{jm}(\vec{r}, t) = e^{i\varphi} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} P_0 \begin{pmatrix} \varphi_{jem}(\vec{r}, t) \\ \chi_{je'm}(\vec{r}, t) \end{pmatrix}$$

$$= e^{i\varphi} \begin{pmatrix} P_0 \varphi_{jem}(\vec{r}, t) \\ -P_0 \chi_{je'm}(\vec{r}, t) \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \varphi_{jem}(\vec{r}, t) \\ \chi_{je'm}(\vec{r}, t) \end{pmatrix}$$

⇒ Paritäten der φ -komponenten ist umgekehrt zu der der χ -komponenten!

- stationäre Dirac-Gleichung für φ und χ -komponenten:

mit $\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow$

$$\begin{aligned}c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \chi + m_0 c^2 \varphi + V \varphi &= E \varphi \\ c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \varphi - m_0 c^2 \chi + V \chi &= E \chi\end{aligned}$$

da $\vec{L} \cdot \vec{p}$ Parität ändert, sieht man auch hier
daß χ und φ umgekehrte Parität haben müssen
← 28.06.

- Separation des Winkelanteils: Kugelspinore

gemeinsame EV von $\vec{J}^2$, J_z , $\vec{L}^2$, $\vec{S}^2$ und $\hat{P}_0$
mit $S = \frac{1}{2}$ und $j = l \pm \frac{1}{2}$

$$\left. \begin{array}{c} \bar{j} = l + \frac{1}{2} \\ \hline \end{array} \right| \quad \mathcal{R}_{\bar{j}=l+\frac{1}{2}, l, m} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\bar{j}+m}{2\bar{j}}} Y_{l, m-\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \\ \sqrt{\frac{\bar{j}-m}{2\bar{j}}} Y_{l, m+\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix}$$

$$\left. \begin{array}{c} \bar{j} = l - \frac{1}{2} \\ \hline \end{array} \right| \quad \mathcal{R}_{\bar{j}=l-\frac{1}{2}, l, m} = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{\bar{j}-m+1}{2\bar{j}+2}} Y_{l, m-\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \\ \sqrt{\frac{\bar{j}+m+1}{2\bar{j}+2}} Y_{l, m+\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\hat{P}_0 \mathcal{R}_{j, l, m} = (-1)^l \mathcal{R}_{j, l, m}}$$

$$\varphi_{j, l, m} = i g(r) \mathcal{R}_{j, l, m}(\vartheta, \varphi)$$

$$\chi_{j, l', m} = -f(r) \mathcal{R}_{j, l', m}(\vartheta, \varphi)$$

mit $l' = l \pm 1$ (umgekehrte Parität und
 $l, l' = j \pm \frac{1}{2}$)

und zwar

$$l' = \begin{cases} l+1 & \text{für } j = l + \frac{1}{2} \\ l-1 & \text{für } j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

es gilt

$$\left(\vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right) \mathcal{R}_{jem} = -\mathcal{R}_{je'm} \quad \text{mit } l' \text{ von oben}$$

so daß

$$-(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \mathcal{R}_{jem} = + (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \left(\vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right) \mathcal{R}_{je'm}$$

mit

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B})$$

folgt dann

$$\begin{aligned} -(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \mathcal{R}_{jem} &= \left(\vec{p} \cdot \frac{\vec{r}}{r} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} \times \frac{\vec{r}}{r}) \right) \mathcal{R}_{je'm} \\ &= \left[-i \hbar (\vec{\nabla} \cdot \vec{r}) - i \hbar \underbrace{\vec{r} \cdot \vec{\nabla}}_{=\partial_r} \right. \\ &\quad \left. - i \vec{\sigma} \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) \right] \frac{1}{r} \mathcal{R}_{je'm} \\ &= -i \left(\frac{2\hbar}{r} + \frac{1}{r} \vec{\sigma} \cdot \vec{L} \right) \mathcal{R}_{je'm} \end{aligned}$$

Nun ist für einen 2-Spinor

$$\vec{J}^2 = \left(\vec{L} + \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \right)^2 = \vec{L}^2 + \left(\frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \right)^2 + \hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{L}$$

$$\Rightarrow \hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{L} \mathcal{R}_{j\ell m} = \left(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \left(\frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \right)^2 \right) \mathcal{R}_{j\ell m}$$

$$= \left(j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \right) \hbar^2 \mathcal{R}_{j\ell m}$$

$$= -(1+\kappa) \hbar^2 \mathcal{R}_{j\ell m}$$

mit

$$\kappa = \begin{cases} -(\ell+1) = -(j+\frac{1}{2}) & \text{für } j = \ell + \frac{1}{2} \\ \ell = +(j+\frac{1}{2}) & \text{für } j = \ell - \frac{1}{2} \end{cases}$$

Einschub der Kugelspinore in stationäre Dirac-Gleichung für x und φ liefert schließlich für die Radialfunktionen $g(r)$ und $f(r)$

$$\hbar c \frac{dg(r)}{dr} + (1+\kappa) \hbar c \frac{g(r)}{r} - [E + m_0 c^2 - V(r)] f(r) = 0$$

$$\hbar c \frac{df(r)}{dr} + (1-\kappa) \hbar c \frac{f(r)}{r} + [E - m_0 c^2 - V(r)] g(r) = 0$$

Substitution

$$g(r) = \frac{G(r)}{r} \quad f(r) = \frac{F(r)}{r}$$

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

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

Solution of coupled radial equations

(i) asymptotisches Verhalten für $r \rightarrow 0$

$$\Rightarrow \dots \Rightarrow G = ar^j \quad F = br^j$$

$$j = (\pm) \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2 \alpha^2} \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$$

wie bei Klein-Gordon Gleichung
existiert $Z_{\max} = (j + 1/2) / \alpha$

(ii) asymptotisches Verhalten für $r \rightarrow \infty$

$$\Rightarrow \dots \Rightarrow G \sim e^{(\pm) s/2}$$

$$s = 2\lambda r \quad \lambda = \frac{[m_0^2 c^4 - E^2]^{1/2}}{\hbar c}$$

Bem.: gebundene Zust. $E < m_0 c^2$

(iii) allg. Potenzreihenansatz

$$G(s) = \sqrt{m_0 c^2 + E} e^{-s/2} (\phi_1(s) + \phi_2(s))$$

$$F(s) = \sqrt{m_0 c^2 - E} e^{-s/2} (\phi_1(s) - \phi_2(s))$$

$$\phi_1 = s^j \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_m s^m \quad \phi_2 = s^j \sum_{m=0}^{\infty} \beta_m s^m$$

$\Rightarrow \dots \Rightarrow$ Rekursionsformeln für α_n, β_n

Abbruchbedingung bei $m=n'$ und

Def: Hauptquantenzahl

$$n = n' + |k| = n' + j + \frac{1}{2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$j + \frac{1}{2} = 1, 2, 3, \dots$$

$$E_{nj} = m_0 c^2 \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left(n - j - \frac{1}{2} + \left[\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - (Z\alpha)^2 \right]^{1/2} \right)^2} \right]^{-1/2}$$

Sommerfeldsche Feinstrukturformel

$$E_{nj} \approx m_0 c^2 \left[1 - \frac{1}{2} \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \left(1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right) + \mathcal{O}((Z\alpha)^6) \right]$$

Grundzustandsenergie

$$E_{n=1, j=\frac{1}{2}} = m_0 c^2 \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{1 - Z^2 \alpha^2} \right]^{-1/2}$$

$$E_{n=1, j=\frac{1}{2}} = m_0 c^2 \sqrt{1 - Z^2 \alpha^2} = m_0 c^2 - \frac{Z^2 \alpha^2 m_0 c^2}{2} - \frac{Z^4 \alpha^4 m_0 c^2}{8} + \dots$$

Grundzustandswellenfunktion

$$\psi_{n=1, j=\frac{1}{2}, \uparrow}(r, \vartheta, \varphi) = A(r)$$

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{i(1-\gamma)}{2\alpha} \cos\vartheta \\ \frac{i(1-\gamma)}{2\alpha} \sin\vartheta e^{i\varphi} \end{bmatrix}$$

$$\psi_{n=1, j=\frac{1}{2}, \downarrow}(r, \vartheta, \varphi) = A(r)$$

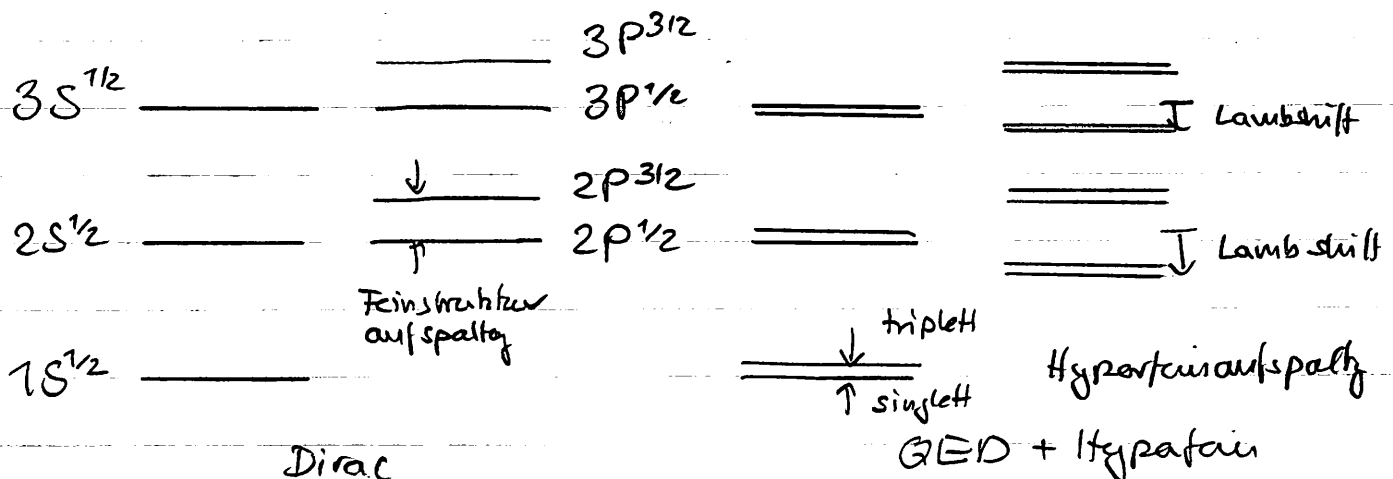
$$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{i(1-\gamma)}{2\alpha} \sin\vartheta e^{-i\varphi} \\ -\frac{i(1-\gamma)}{2\alpha} \cos\vartheta \end{bmatrix}$$

$$A(r) \stackrel{\gamma=r=1}{=} \frac{(2m_0 Z \alpha)^{3/2}}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{1+\gamma}{2\Gamma(1+2\gamma)}} (2m_0 Z \alpha r)^{\gamma-1} e^{-m_0 Z \alpha r}$$

$$\text{mit } \gamma = \sqrt{1-Z^2 \alpha^2} \quad \text{d.h. } j=\frac{1}{2}$$

Feinstruktur

$$\Delta E_{nj} = -\frac{1}{2} \frac{(Z\alpha)^4 m_0 c^2}{n^3} \left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right)$$



(B) Foldy Wouthuysen Transformation und relativistische Korrekturen des Wasserstoffproblems

Ziel: Beschreibung relativistischer Korrekturen
im H-Problem (oder allg. von Elektronen
in elm. Potentialen) ohne Kopplung von
positiv- und negativ-Energie Lösungen
 $\Rightarrow$ Gleichung für zweikomponentige Spinoren

Idee: unitäre Transformation der Operatoren
 $(\vec{\alpha}, \beta, \gamma_5)$ eliminiert die obere u. untere Komp.
mischen

$$\boxed{\phi = \hat{U} \psi = e^{i\hat{S}} \psi} \quad \hat{S}^\dagger = \hat{S}^+$$

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = e^{-i\hat{S}} e^{i\hat{S}} = \mathbb{1}$$

Bewegungsgleichung und transformierter Hamiltonian

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi &= -i\hbar \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} e^{i\hat{S}} \psi + e^{i\hat{S}} \hat{H} \psi \\ &= -i\hbar \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} e^{i\hat{S}} e^{-i\hat{S}} \phi + e^{i\hat{S}} \hat{H} e^{-i\hat{S}} \phi \\ &= \hat{H}_\phi \phi \end{aligned}$$

$$\boxed{\hat{H}_\phi = e^{i\hat{S}} \hat{H} e^{-i\hat{S}} - i\hbar \frac{\partial \hat{S}}{\partial t}}$$

• Feldfreier Fall $[\vec{p}, H] = 0$

Ansatz: Impulsoperator $\vec{p} \rightarrow \vec{p}$

$$\vec{S} = -\frac{1}{2m_0c} (\beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p}) f\left(\frac{p}{m_0c}\right)$$

f ist noch zu bestimmende Funktion

$$\vec{S}^+ = \vec{S}^- \quad \text{da} \quad \{\beta, \vec{\alpha}\} = 0$$

daher $H\phi = e^{i\vec{S}} (c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_0c^2) e^{-i\vec{S}}$

$$= e^{i\vec{S}} \beta (c\beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + m_0c^2) e^{-i\vec{S}}$$

$$= e^{i\vec{S}} \underbrace{\beta e^{-i\vec{S}} \beta}_{=1} (c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_0c^2)$$

"u.A." $\beta e^{-i\vec{S}} = e^{i\vec{S}} \beta$

d.h. $H\phi = e^{i\vec{S}} (c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_0c^2)$

Reihenentwicklung von $e^{2i\vec{S}}$ und $(\beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p})^2 = -\vec{p}^2$
 liefert selbes Resultat $y = p/m_0c$

$$H\phi = \beta \left[m_0c^2 \cos(y f(y)) + c p \sin(y f(y)) \right]$$

$$+ \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \left[p c \cos(y f(y)) - m_0c^2 \sin(y f(y)) \right]$$

$$= -159 =$$

wicht.-rel. Grenzfall:

wählen wir

$$y f(y) = \arctan(y)$$

$$y = \frac{p}{m_0 c} \ll 1$$

$$f(y) \approx 1$$

dann verschwindet die zweite Klammer und

$$\hat{H}\psi = \hat{\beta} \left[m_0 c^2 \cos\left(\arctan\left(\frac{p}{m_0 c}\right)\right) + cp \sin\left(\arctan\left(\frac{p}{m_0 c}\right)\right) \right]$$

$$= \hat{\beta} c \sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}$$

$$= \hat{\beta} E_p$$

fabriziert in 2×2 Matrizen!

wobei $\arctan x = \arcsin \frac{x}{\sqrt{1+x^2}} = \arccos \frac{1}{\sqrt{1+x^2}}$ verwendet wurde

Man zeigt leicht (Ü.A.)

$$\psi_{p, \lambda, \frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{m_0 c^2 + E}{2E}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp}{m_0 c^2 + E} \\ 0 \end{pmatrix} \frac{e^{ipz/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad \begin{matrix} E = 2E_p \\ p = \vec{p} \cdot \vec{e} \end{matrix}$$

↓

$$\underline{\lambda = 1}$$

$$\underline{\lambda = -1}$$

$$\phi_{p, 1, \frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \frac{e^{ipz/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

$$\phi_{p, -1, \frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \frac{e^{ipz/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

und analog für negative Helizität

• Wechselwirkung mit elm. Feld

$$\hat{H} = \beta m_0 c^2 + \underbrace{c \vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A})}_{\hat{O}} + e A_0$$

$$\hat{O} \equiv c \vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}) \quad \begin{array}{l} \text{koppelt obere und} \\ \text{untere Spinorkomponenten} \end{array}$$

Ansatz:

$$\hat{S} = -\frac{i}{2m_0 c} \beta \vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}) = -\frac{i}{2m_0 c^2} \hat{O}$$

- Bem.: (i) hier keine Impulsdarstellung d.h. $\vec{p}$ anstelle $\vec{p}$!
 (ii) zunächst keine Funktion f wie im freien Fall, d.h. $f=1$; sollte gut sein im nicht-relativ. Grenzfall

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= e^{i\hat{S}} \hat{H} e^{-i\hat{S}} = \hat{H} + i[\hat{S}, \hat{H}] - \frac{1}{2}[\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}]] \\ &\quad - \frac{i}{6}[\hat{S}, [\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}]]] + \frac{1}{24}[\hat{S}, [\hat{S}, [\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}]]]] + \dots \end{aligned}$$

Bew.: siehe Ü.A.

... $\Rightarrow$ Beschränkung auf Terme bis zur Ordnung $1/m_0^3 c^6 \Rightarrow \dots \Rightarrow$

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \beta \left(m_0 c^2 + \frac{1}{2m_0 c^2} \hat{O}^2 - \frac{1}{8m_0^3 c^6} \hat{O}^4 \right) + e A_0 \\ &\quad - \frac{1}{8m_0^3 c^6} [\hat{O}, [\hat{O}, e A_0]] \end{aligned}$$

$$+ \frac{1}{2m_0 c^2} \beta [\hat{O}, e A_0] - \frac{1}{3m_0^2 c^4} \hat{O}^3 - \frac{1}{48m_0^3 c^6} \beta [\hat{O}, [\hat{O}, [\hat{O}, e A_0]]]$$

Terme die untere und obere Spinorkomponenten koppeln (ungerade Potenzen von $\vec{\partial}$) nur noch $\sim 1/m_0 c^2$

weitere Reduktion durch sukzessive F.-W.-Trasf.

2. Foldy-Wouthuysen Transformation

$$\vec{S}' = -\frac{i}{2m_0 c^2} \vec{\partial}^2 \quad \vec{\partial}' = e^{i\vec{S}'} \vec{\partial} e^{-i\vec{S}'}$$

$\hat{H}''$ enthält Kopplungsterme in Ordnung $1/(m_0 c^2)^2$

3. Foldy-Wouthuysen Transformation

$$\vec{S}'' = -\frac{i}{2m_0 c^2} \vec{\partial}''^2 \quad \vec{\partial}'' = e^{i\vec{S}''} \vec{\partial}' e^{-i\vec{S}''}$$

$\hat{H}'''$ enthält Kopplungsterme in Ordnung $1/(m_0 c^2)^3$

$$\hat{H}''' = \beta \left(m_0 c^2 + \frac{1}{2m_0 c^2} \vec{\partial}^2 - \frac{1}{2m_0^3 c^6} \vec{\partial}^4 \right) + eA_0 \\ - \frac{1}{8m_0^2 c^4} [\vec{\partial}, [\vec{\partial}, eA_0]] + \mathcal{O}\left(\left(\frac{1}{m_0 c^2}\right)^4\right)$$

explizite Auswertung liefert

$$\hat{H}\phi = \hat{H}''' = \beta \left[m_0 c^2 + \frac{1}{2m_0} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{1}{8m_0^3 c^2} \vec{p}^4 \right] + eA_0 \\ - \frac{1}{2m_0} \beta e \hbar (\vec{\Sigma} \cdot \vec{B}) - \frac{i e \hbar^2 c^2}{8m_0^2 c^4} \vec{\Sigma} \cdot \text{rot } \vec{E} \\ - \frac{e \hbar}{4m_0^2 c^2} \vec{\Sigma} \cdot (\vec{E} \times \vec{p}) - \frac{e \hbar^2 c^2}{8m_0^2 c^4} \text{div } \vec{E}$$

Diskussion der Terme

• 1. Term Reihenentwicklung von $\sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2}$

• 2. Term elektrost. Potential

• 3. Term Kopplung des Spin-magnet. Moments des Elektrons an ein äußeres Magnetfeld

• 4. + 5. Term un zusammengefasst kann man als Spin-Bahn Kopplung

für sphärisch symmetr. Potential $\vec{E} = -\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} V(r)$
und somit $\text{rot } \vec{E} = 0$

$$\begin{aligned}\vec{\Sigma} \cdot (\vec{E} \times \vec{p}) &= -\frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \vec{\Sigma} \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) \\ &= -\frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} (\vec{\Sigma} \cdot \vec{L})\end{aligned}$$

d.h.

$$\boxed{H_{\text{Spin-Bahn}} = \frac{e\hbar}{4m_0^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \vec{\Sigma} \cdot \vec{L}}$$

Spin-Bahn Kopplung

• 6. Term: Darwin Term Kontaktwechselwirkung mit Kern

bei Punktkern $\text{div } \vec{E} = -\Delta\phi = 4\pi e \delta(\vec{r})$
am Ursprung

$$= 16\pi e =$$

$$\hat{H}_{\text{Darwin}} = - \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{8m_0^2 c^2} \delta(\vec{r})$$

• Hyperfeinstruktur

Auch wenn nicht in F.-W.-Hamiltonian explizit enthalten, einfache Erweiterung auf Hyperfeinwechselwirkung möglich:

Proton hat spin und magnet. Moment g_p
 $\Rightarrow$ erzeugt magnet. Dipolfeld $\vec{B}_I$

$$\hat{H}_{\text{HF}} = - \frac{1}{2m_0 c} \beta \hbar (\vec{\Sigma} \cdot \vec{B}_I)$$

$$\vec{B}_I = - \frac{g_p e}{2m_p} \int d^3\vec{r}' \rho_p(\vec{r}') \vec{\nabla} \times (\vec{\sigma}_I \times \vec{\nabla}) \frac{1}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|}$$

$\vec{\sigma}_I$ - Spinoperator

ρ_p - Dichte d. magn. Moments

g_p - gyromagn. Faktor

m_p - Masse

des Protons

$$\vec{B}_I = - \frac{2}{3} g_p \frac{e}{2m_p} \vec{I} \rho_p(\vec{r})$$

$$\hat{H}_{\text{HF}} = + \frac{1}{6} \frac{g_p e^2}{m_0 m_p} \beta (\vec{\Sigma} \cdot \vec{\sigma}_I) \rho_p(\vec{r})$$

oberer Spinor $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ $\vec{I} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}_I$

$$\hat{H}_{HF} = - \frac{2}{3\hbar^2} \frac{g_p e^2}{m_0 m_p} (\vec{S} \cdot \vec{I}) S_p(F)$$

Gesamtspin $\vec{F} = \vec{I} + \vec{S}$

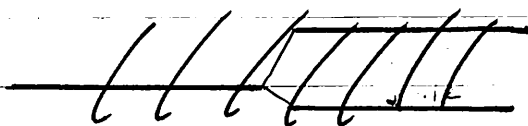
$$\vec{F}^2 = \vec{I}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{I} \cdot \vec{S} \quad \text{Erhaltunggröße}$$

Eigenwerte von $\vec{F}^2$: $\hbar^2 F(F+1)$

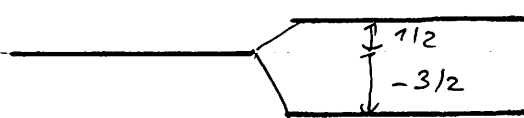
$$F = \begin{cases} I+S & = 1 & \text{Triplett} \\ I-S & = 0 & \text{Singlett} \end{cases}$$

Eigenwerte von

$$2\vec{S} \cdot \vec{I} = \begin{cases} 2 - \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) : \frac{1}{2} \\ 0 - \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) : -\frac{3}{2} \end{cases}$$



ohne HF mit HF



Triplett $F=1$

Singlett $F=0$