Seminar zur Vorlesung
TPV: Fortgeschrittene Konzepte der Quantenphysik

Prof. Dr. Giovanna Morigi

SoSe 2013 **Blatt 7** **31.05.2013**

Aufgabe 15 *Teilchen im Zentralpotential*

Der Hamiltonoperator eines einzelnen Elektrons in einem Zentralpotential $V(\vec{r}) = V(r)$ ist gegeben durch

$$H = c\,\vec{\hat{\boldsymbol{\alpha}}} \cdot \vec{p} + \hat{\boldsymbol{\alpha}}_{\boldsymbol{t}} mc^2 + V(r)\,. \tag{1}$$

a) Zeigen Sie, dass der Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}$ eine Erhaltungsgröße ist. *(1 Punkt)*

b) In der nichtrelativistischen Quantenmechanik legen die Eigenwerte des Operators $\vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{J}$ fest, ob der Spin des Elektrons parallel oder antiparallel zum Gesamtdrehimpuls $\vec{J}$ ausgerichtet ist. Wir wollen dies nun für die relativistische Quantenmechanik erweitern.

Zeigen Sie dazu, dass der Operator $K = \hat{\boldsymbol{\alpha}}_{\boldsymbol{t}}(\vec{\Sigma} \cdot \vec{J} - \hbar/2)$ eine Erhaltungsgröße ist, die auch mit dem Gesamtdrehimpuls kommutiert.

Hinweis: Zeigen Sie zunächst, die Identität

$$(\vec{\hat{\boldsymbol{\alpha}}} \cdot \vec{A})(\vec{\Sigma} \cdot \vec{B}) = -\hat{\boldsymbol{\gamma}}_{\boldsymbol{5}} \vec{A} \cdot \vec{B} + \mathrm{i}\vec{\hat{\boldsymbol{\alpha}}} \cdot (\vec{A} \times \vec{B})\,, \tag{2}$$

wobei $\hat{\boldsymbol{\gamma}}_{\boldsymbol{5}}$ durch

$$\hat{\boldsymbol{\gamma}}_{\boldsymbol{5}} = \hat{\boldsymbol{\gamma}}_{\boldsymbol{1}}\hat{\boldsymbol{\gamma}}_{\boldsymbol{2}}\hat{\boldsymbol{\gamma}}_{\boldsymbol{3}}\hat{\boldsymbol{\gamma}}_{\boldsymbol{4}} = \begin{pmatrix} 0_2 & -\mathbb{1}_2 \\ -\mathbb{1}_2 & 0_2 \end{pmatrix} \tag{3}$$

gegeben ist. Die Identität $\hat{\boldsymbol{\alpha}}_{\boldsymbol{j}} = -\Sigma_j \hat{\boldsymbol{\gamma}}_{\boldsymbol{5}} = -\hat{\boldsymbol{\gamma}}_{\boldsymbol{5}} \Sigma_j$ kann hilfreich sein. *(2 Punkte)*

c) Als Folge lassen sich simultane Eigenfunktionen zu H, K, $\vec{J}^2$ und J_3 konstruieren, mit den jeweiligen Eigenwerten E, $-\hbar\kappa$, $\hbar^2 j(j+1)$ und $\hbar j_3$. Bestimmen Sie die Beziehung zwischen den Eigenwerten κ und j, indem Sie zunächst die Eigenwerte von $\vec{K}^2$ und $\vec{J}^2$ miteinander vergleichen. *(1 Punkt)*

d) Bestimmen Sie aus den erhaltenen Ergebnissen die Eigenwertgleichungen für die zweikomponentigen Spinoren ψ_A und ψ_B, die die positive und negative Energiekomponenten des vierkomponentigen Spinors $\psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}$ sind, für die Operatoren K, $\vec{J}^2$, und J_3. Zeigen Sie, dass die zweikomponentigen Spinoren ψ_A, ψ_B einer solchen Eigenfunktion jeweils für sich auch Eigenfunktionen zu $\vec{L}^2$ mit den entsprechenden Eigenwerten $\hbar^2 l_A(l_A+1)$ und $\hbar^2 l_B(l_B+1)$ sind, obwohl ψ selbst keine Eigenfunktion zu $\vec{L}^2$ ist. Wie lauten die Beziehungen zwischen l_A, l_B, j und κ? *(1 Punkt)*

Aufgabe 16 *Radialgleichung des Wasserstoffatoms*

Wir betrachten im folgenden das Potential $V(r) = -(e^2/4\pi r)$ des Wasserstoffatoms.

a) Wir nehmen folgenden Separationsansatz für die Wellenfunktion an,

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g(r)\mathcal{Y}^{j_3}_{j,l_A} \\ \mathrm{i}f(r)\mathcal{Y}^{j_3}_{j,l_B} \end{pmatrix} . \tag{4}$$

Hierbei sind die $\mathcal{Y}^{j_3}_{j,l}$ jeweils Eigenfunktionen zu $\vec{J}^2$, J_3 und $\vec{L}^2$, und sie erfüllen aufgrund von Paritätsbetrachtungen die folgenden Beziehungen:

$$\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{x}}{r}\mathcal{Y}^{j_3}_{j,l_A} = -\mathcal{Y}^{j_3}_{j,l_B} \, , \tag{5}$$

$$\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{x}}{r}\mathcal{Y}^{j_3}_{j,l_B} = -\mathcal{Y}^{j_3}_{j,l_A} \, , \tag{6}$$

$$\tag{7}$$

Leiten Sie damit, und mit der Beziehung $\vec{\sigma}\cdot\vec{p} = \frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{x}}{r^2}(-\mathrm{i}\hbar r\frac{\partial}{\partial r} + \mathrm{i}\vec{\sigma}\cdot\vec{L})$, die folgenden Radialgleichungen aus der Dirac-Gleichung her:

$$-c\hbar\left(\frac{df}{dr} + \frac{(1-\kappa)}{r}f\right) = \left(E - V - mc^2\right)g \tag{8}$$

$$c\hbar\left(\frac{dg}{dr} + \frac{(1+\kappa)}{r}g\right) = \left(E - V + mc^2\right)f \, . \tag{9}$$

(1 Punkt)

b) Leiten Sie mit den Ersetzungen $F(r) = rf(r)$ und $G(r) = rg(r)$ sowie den Abkürzungen $c_1 = (mc^2 + E)/\hbar c$, $c_2 = (mc^2 - E)/\hbar c$, $\alpha = (e^2/4\pi\hbar c) \simeq 1/137$ (die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante in Heavidside-Lorentz-Einheiten) und $\rho = \sqrt{c_1c_2}\,r$ die folgenden gekoppelten Gleichungen her:

$$\left(\frac{d}{d\rho} - \frac{\kappa}{\rho}\right)F - \left(\sqrt{\frac{c_2}{c_1}} - \frac{\alpha}{\rho}\right)G = 0 \tag{10}$$

$$\left(\frac{d}{d\rho} + \frac{\kappa}{\rho}\right)G - \left(\sqrt{\frac{c_1}{c_2}} + \frac{\alpha}{\rho}\right)F = 0 \, . \tag{11}$$

Zeigen Sie, dass die Faktorisierung $F = e^{-\rho}\rho^s\sum_{m=0}^{\infty} f_m\rho^m$ und $G = e^{-\rho}\rho^s\sum_{m=0}^{\infty} g_m\rho^m$, mit $f_0, g_0 \neq 0$, auf die folgenden Rekursionsrelationen führt:

$$(s + q - \kappa)f_q - f_{q-1} + \alpha g_q - \sqrt{c_2/c_1}g_{q-1} = 0 \tag{12}$$

$$(s + q + \kappa)g_q - g_{q-1} - \alpha f_q - \sqrt{c_1/c_2}f_{q-1} = 0 \, . \tag{13}$$

Zeigen Sie weiter, dass $s = \pm\sqrt{\kappa^2 - \alpha^2}$ erfüllt. Warum kann nur die positive Wurzel auf eine gültige Lösung führen? *(2 Punkte)*

n	$n' = n - |\kappa| \geq 0$	$\kappa = \pm(j + \frac{1}{2})$	spektroskopische Notation
1	0	-1	$1s_{\frac{1}{2}}$
2	1	-1	$2s_{\frac{1}{2}}$
2	1	$+1$	$2p_{\frac{1}{2}}$
2	0	-2	$2p_{\frac{3}{2}}$
3	2	-1	$3s_{\frac{1}{2}}$
3	2	$+1$	$3p_{\frac{1}{2}}$
3	1	-2	$3p_{\frac{3}{2}}$
3	1	$+2$	$3d_{\frac{3}{2}}$
3	0	-3	$3d_{\frac{5}{2}}$

Tabelle 1: Beziehung zwischen den relativistischen Quantenzahlen und der in der Atomphysik gebräuchlichen spektroskopischen Notation.

c) Wir nehmen an, dass beide Potenzreihen bei der gleichen Ordnung abbrechen, d.h. für ein bestimmtes n' gilt:

$$f_{n'+1} = g_{n'+1} = 0, \qquad f_{n'} \neq 0, \qquad g_{n'} \neq 0. \tag{14}$$

Leiten Sie damit eine Beziehung zwischen $f_{n'}$ und $g_{n'}$ her, und zeigen Sie, dass die Energieeigenwerte durch

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{\left(n' + \sqrt{(j+\frac{1}{2})^2 - \alpha^2}\right)^2}}} \tag{15}$$

gegeben sind.

In Tabelle 1 ist die Beziehung zwischen den relativistischen Quantenzahlen und der spektroskopischen Notation gegeben, sowie die Beziehung zwischen der Hauptquantenzahl n der nichtrelativistischen Quantenmechanik und n' der Dirac-Theorie, welche durch $n = n' + (j + \frac{1}{2}) = n' + |\kappa|$ gegeben ist. Für n gilt die Relation $n \geq 1$ (warum?). Weshalb sind in der Tabelle für $n' = 0$ nur die Zustände mit $\kappa < 0$ angegeben? Bestimmen Sie weiter mit Hilfe von Gleichung (15), welche der in der Tabelle angegebenen Zustände degeneriert sind. *(2 Punkte)*