

## 5. Störungstheorie f. Eielektronenatom $1104$

- relativist. Korrekturen aus leicht VL: Störungen  $\rightarrow$  Störungstheorie

### 5.1. Sinnvolle Eigenzustände

- Problem: Spin-Bahn-Kopplg. ( $H_3$ )

ungefährtes H-Atom:  $|n, l, m_l, m_s\rangle$  (QHI)

wenn mit diesen Eigenzuständen  $H_3$ -Matrix durch beachtet werden:

$\langle n', l', m_l', m_s' | H_3 | n, l, m_l, m_s \rangle$  i.a. nicht diagonal

d.h. u.u. großes Eigenwertproblem  $\rightarrow \neq \delta_{ll'} \delta_{m_l m_l'} \delta_{m_s m_s'}$

$\rightarrow$  ungünstig

- Ursache:  $H_3 \sim \vec{L} \cdot \vec{S}$  hat nicht Eigenzustände  $|n, l, m_l, m_s\rangle$

- Idee: neuer Satz v. Operatoren die auch mit  $H_3$  vertauschen

keine gute Quantenzahlen  
weil  $L^2, S^2$  nicht  
mit  $H_3$  vertauschen

alter Satz

$$\left\{ \underset{=}{H_0}, \underset{=}{L^2}, \underset{=}{L^z}, \underset{=}{S^2}, \underset{=}{S^z} \right\}$$

$H_0$ : H-Atom Schrödingergl.

vertauschen!

neuer Satz

$$\left\{ H_0 + H_{st}, \underset{=}{L^2}, \underset{=}{J^2}, \underset{=}{J^z}, \underset{=}{S^2} \right\}$$

vertauscht jetzt auch mit  $H_3$

- warum:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad \text{ist günstig, denn}$$

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = ?$$

$$\vec{j}^2 = (\vec{s} + e \vec{i})^2 = \vec{s}^2 + 2 \vec{s} \cdot e + e^2 \vec{i}^2$$

$$\vec{e} \cdot \vec{s} = \frac{1}{2} \left( \vec{j}^2 - \vec{s}^2 - e^2 \vec{i}^2 \right)$$

→ Spin-Bahn wird auf unproblematisch Operator zurückgeführt

- da man zeigen kann, daß  $\vec{j}$  Drehimpuls quantisiert erfüllt, d.h.  $[\hat{j}^x, \hat{j}^y] = i \hbar \hat{j}^z$ , z.B. (folgt aus Def.)

gilt:

$$a) \exists \text{ Eigenzustände: } \hat{j}^z |j, m_j\rangle = \hbar m_j |j, m_j\rangle$$

$$\hat{j}^2 |j, m_j\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m_j\rangle$$

b) Quantenzahlen: wenn  $l$  und  $s = \frac{1}{2}$  festgehalten werden

$$\Downarrow \text{ mögl. } j\text{-Werte: } \{j\} = \left\{ |l - \frac{1}{2}|, |l - \frac{1}{2}| + 1, \dots, l + \frac{1}{2} \right\}$$

$$\text{jeder } j \text{ Wert hat Satz mögl. } m_j\text{-Werte: } \{m_j\} = -j, -j+1, \dots, j$$

- zu bestimmen sind Eigenzustände durch Entwickl. nach  $|u, l, m_l, m_s\rangle$ :

$$|u, l, j, s = \frac{1}{2}, m_j\rangle = \sum_{m_l, m_s} |u, l, m_l, m_s\rangle \underbrace{\langle u, l, m_l, m_s | u, l, j, s = \frac{1}{2}, m_j\rangle}_{\text{Zahlen}}$$

$$|u, l, m_l, m_s\rangle = |u, l\rangle |l, m_l\rangle |m_s\rangle$$

$$\text{Ortsdarstellung: } R_{ue}(r) \underline{Y_{lm}}(\vartheta, \varphi) \underline{\chi_{m_s}}$$

$$\underline{|u, l, j, s = \frac{1}{2}, u_j\rangle} = |u, l\rangle \underbrace{|l, j, s = \frac{1}{2}, u_j\rangle}_{?}$$

$$= |u, l\rangle \sum_{u_s, u_e} \langle u, l | u, l \rangle \langle l, u_e, u_s | l, j, s = \frac{1}{2}, u_j \rangle |l, u_e, u_s\rangle$$

$$= |u, l\rangle \sum_{u_s, u_e} \underbrace{\langle l, j, s = \frac{1}{2} | u_e, u_s \rangle}_{\text{Clebsch-Gordan Koeffizient}} \underline{|l, u_e, u_s\rangle}$$

Clebsch-Gordan Koeffizient  
Clebsch Koeffizienten

Hoffnung: Störmatrix diagonal in den neuen Wellenfkt. ( $j$ )

setzen:  $u = u'$  in Störmatrix

um im Nennern keine  $u$ 's zu rechnen

## 5.2. Interpretation / Berechn. relativistischer Korrekturen

### a) Korrektur d. Energie dispersion

$$\underline{H_1} = - \frac{\vec{p}}{8m_0^3 c^2} \hat{1}$$

Interpretation: Energie dispersion  $E = (m_0^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2)^{1/2}$

$$E = m_0 c^2 \sqrt{1 + \frac{\vec{p}^2}{m_0^2 c^2}}$$

Relevanz im Nennern, groß gegen  $\frac{p^2}{m_0^2 c^2}$

$$\approx m_0 c^2 + \frac{\vec{p}^2}{2m_0} - \frac{1}{8} \frac{\vec{p}^4}{m_0^3 c^2} + \dots$$

Rechenziele      Schrödingers  
 anteil              1. Korrektur zur  
                          Schrödingers Theorie

Energiekorrektur:  $\Delta E_{n,1} = \langle u_{\ell, s, m_{\ell}} | H_{n,1} | u_{\ell', s', m_{\ell}'} \rangle$   
 $s = \frac{1}{2}$

$$\langle u_{\ell, \ell} | \langle j, \ell, s, m_{\ell} | - \frac{\vec{p}^4}{8m_0^3 c^2} | u_{\ell'} \rangle | j', \ell', s, m_{\ell}' \rangle$$

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V_{\text{Coul}}(\vec{r}) \quad \downarrow \quad \vec{p}^4 = [2m_0 (H_0 - V_{\text{Coul}})]^2$$

H-Atom  
 verwenden

wissen:  $H_0 |u_{\ell'}\rangle |j', \ell', s, m_{\ell}'\rangle = E_n^0 |u_{\ell'}\rangle |j', \ell', s, m_{\ell}'\rangle$   
 $\hat{L} = -\frac{1}{\hbar^2} \nabla_{\varphi}^2$

das ungestörte Problem wird d. die ungestörte Wellenfkt. gelöst  
 (die oft sowieso)

$$\Delta E_{n,1} = \langle u_{\ell} | \langle j, \ell, s, m_{\ell} | \left( - \frac{(H_0 - V_{\text{Coul}})^2}{2m_0 c^2} \right) | u_{\ell'} \rangle | j', \ell', s, m_{\ell}' \rangle$$

$$= - \frac{1}{2m_0 c^2} \langle u_{\ell} | \langle j, \ell, s, m_{\ell} | \left[ E_n^0 + 2 E_n^0 \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \left( \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right)^2 \right] | u_{\ell'} \rangle | j', \ell', s, m_{\ell}' \rangle$$

$$V_{\text{Coul}} = - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad z: \text{Kernladungszahl}$$

$$= - \frac{1}{2m_0 c^2} \langle u_{\ell} | \left[ \dots \right] | u_{\ell'} \rangle \underbrace{\langle j, \ell, s, m_{\ell} | j', \ell', s, m_{\ell}' \rangle}_{\substack{\delta_{jj'} \delta_{\ell\ell'} \delta_{m_{\ell} m_{\ell}'} \\ \int d^3r R_{\ell\ell'}^*(r) \cdot [ \dots ] R_{\ell\ell'}(r)}} \Rightarrow \text{diagonal}$$

$$\Delta E_1 = -R_{yd} (Z\alpha)^2 \frac{1}{4} \left( \frac{4}{l+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right)$$

$$R_{yd} = \frac{1}{2} m_0 c^2 \alpha^2 Z^2 \quad \left( \alpha = \frac{1}{137} \dots \text{Feinstukturkonstante} \right)$$

Bemerkung: (i)  $E = E^0 + \Delta E_1 \Rightarrow E = E(l, l)$

die Entartg. bzgl.  $l$  stellt zu Diskussion, siehe unten

(ii) Störtheorie stabil und  $(Z\alpha)^2 \sim \left( \frac{Z}{137} \right)^2$

für große  $Z$  bricht Störtheorie zusammen

b) Relativistische Felder können mittels stark lokalisiert werden:

$$H_2 = - \frac{\hbar^2}{8m_0^2 c^2 \epsilon_0} \nabla^2 \rho_{\text{ken}}(\vec{r}) \quad q = -e \quad (e > 0)$$

$$= - \frac{q \rho_{\text{ken}}}{8\epsilon_0 \lambda_c^2} \quad \lambda_c : \text{Compton Wellenlänge}$$

Folgerung:

$$\Delta E \cdot \Delta t \gtrsim \hbar \quad \text{Energie-Zeit Unschärfe}$$

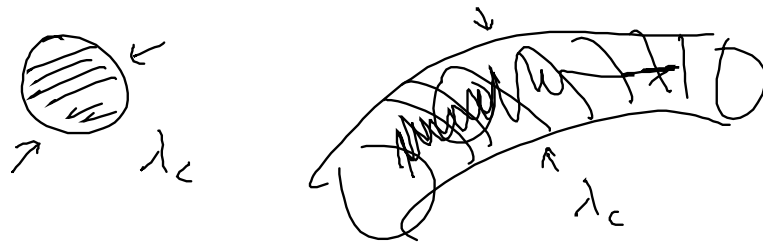
$$\Delta E = m_0 c^2 \quad \text{als Minimum mgl.}$$

$$m_0 c^2 \frac{\Delta x}{\Delta v} = m_0^2 c^2 \frac{\Delta x}{\Delta p} = \frac{m_0^2 c^2 \Delta x^2}{\hbar} \gtrsim \hbar$$

Heisenberg

$$\Delta x \gtrsim \frac{\hbar^2}{m_0^2 c^2} = \lambda_c^2$$

relativist. Teilchen können nicht unterhalb von  $\lambda_c$  lokalisiert werden.



Schrödingers: „Zitterbewegung“

Zitterbewegung „tastet“ Kernpotential zusätzlich ab:

$$\phi_{\text{Kern}}(\vec{R} + \delta\vec{r}) = \phi_{\text{Kern}}(\vec{R}) + \delta\vec{r} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{R}} \phi_{\text{Kern}} + \frac{1}{2} (\delta\vec{r} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{R}})^2 \phi_{\text{Kern}}$$

„klassisch“, wenn  $\delta\vec{r}$  fast immer am Mittelwert 0:

$$\langle \phi_{\text{Kern}}(\vec{R} + \delta\vec{r}) \rangle = \langle \phi_{\text{Kern}}(\vec{R}) \rangle + 0 + \frac{1}{2} \langle (\delta\vec{r} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{R}})^2 \rangle \phi_{\text{Kern}}$$

Auswahl: mittlere Abw.  $\langle \delta\vec{r}^2 \rangle \approx \lambda_c^2$  ≠ 0 quadratisch Abw.

$$|1\text{-dimensional}| \approx \phi_{\text{Kern}}(R) + \frac{\hbar^2}{2m_0^2 c^2} \Delta_R$$

erinnert stark an Darwin term

Berechnung Störung:

$H_2 \sim \delta(|\vec{r}|)$  als Kernladungsdichte

Reduz. f. Winkelanteile analog zu a):

$$\Delta E_2 = \frac{\hbar^2 e^2 z}{8m_0^2 c^2 \epsilon_0} \langle u_{l,0} | \delta(|\vec{r}|) | u_{l,0} \rangle \delta_{l,0} \delta_{j,j'} \delta_{m_j,m_j'}$$

da wir s-Zustände ein endliche AWD bei  $|\vec{r}|=0$  haben, gilt:

$$= \frac{\hbar^2 e^2 z}{8m_0^2 c^2 \epsilon_0} \underbrace{\langle u_{l,0} | \delta(|\vec{r}|) | u_{l,0} \rangle}_{\frac{z^3}{\pi a_B^3 4^3}} \delta_{l,0}$$

$a_B$ : Bohrscher Radius

$$\Delta E_2 = R_{yd} (\alpha z)^2 \frac{1}{4^3} \delta_{l,0}$$

Der Darwin term führt zu einer Erhöhung der s-Energie  
 durch das „Verdunnere“ d. Kernpotentials.

c) Spin-Bahn-Kopplg.

$$H_3 = \frac{\hbar}{2m_0^2 c^2 r} \vec{j} \cdot \vec{l}$$

Interpretation:

Im Ruhesystem des Elektronen wird Kern als Strom  
mit zugehörige Magnetfeld wahrgenommen  
das Magnetfeld ( $v\vec{e}$ ) wechselwirkt mit Spin.

$$\Delta E_3 = \frac{e^2 z}{2m_0^2 c^2 4\pi \epsilon_0} \underbrace{\langle u \ell | \frac{1}{|r|^3} | u \ell \rangle}_{\text{Eisen Kernpotential}} \frac{1}{2} \left[ j(j+1) - l(l+1) - (s+1)s \right] \frac{1}{4^2}$$

(Seite 1 des VL)  $s = \frac{1}{2}$

einsetzen von:  $s = \frac{1}{2}, j = l \pm \frac{1}{2}$

$$s(s+1) = \frac{3}{4}$$

$$\Delta E_3 \begin{cases} j = l + \frac{1}{2} \\ j = l - \frac{1}{2} \\ l = 0 \end{cases} = \left( \frac{1}{4\pi \epsilon} \right)^4 \frac{m_0 z^4 e^8}{4c^4 \hbar^4} \frac{1}{4^2} \frac{1}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \begin{cases} l \\ -l-1 \\ 0 \end{cases}$$