Übungen zur Experimentalphysik III
Wintersemester 2010/2011

Institut für Atom- und Molekülphysik
Leihgesterner Weg 217, 35392 Gießen

Lösungen zum Präsenzaufgabenblatt 10 vom 12.01.2011

Aufgabe P10.1

Laut der Diractheorie des Wasserstoffatoms ist die Bindungsenergie eines Elektrons in einem wasserstoffähnlichen Ion mit Kernladung Z gegeben als

$$E_{nj} = m_e c^2 \left\{ \left[1 + \left(\frac{\alpha Z}{n - j - 1/2 + \sqrt{(j+1/2)^2 - (\alpha Z)^2}} \right)^2 \right]^{-1/2} - 1 \right\} \tag{P10.1}$$

Dabei ist die Quantenzahl n die Hauptquantenzahl des Zustands und j der Gesamtdrehimpuls des Elektrons, d. h. die Diractheorie berücksichtigt die atomare Feinstruktur *ab initio*. Die Feinstrukturkonstante α hat den Wert $1/137.035\,9991$. Zeigen Sie durch Entwickeln von Gl. P10.1 nach Potenzen von αZ (bis zur 4. Potenz), dass die durch die Feinstruktur bedingte Energieverschiebung in leichten wasserstoffähnlichen Systemen mit $\alpha Z < 1$ näherungsweise berechnet werden kann als

$$E_{nj} - E_n = \frac{E_n}{n} (\alpha Z)^2 \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \tag{P10.2}$$

Dabei ist E_n die Bohrsche Bindungsenergie eines Elektrons in der n-ten Schale.

Hinweis

Die Rydbergkonstante für unendlich schwere Kerne lässt sich schreiben als $\mathcal{R} = m_e c^2 \alpha^2 / 2$.

Lösung

Mit der Definition

$$N \equiv \left[n - j - 1/2 + \sqrt{(j+1/2)^2 - (\alpha Z)^2} \right]^{-2} \tag{P10.3}$$

lässt sich Gl. P10.1 umschreiben in

$$E_{nj} = m_e c^2 \left\{ \left[1 + N (\alpha Z)^2 \right]^{-1/2} - 1 \right\} \tag{P10.4}$$

Entwicklung der Wurzel nach Potenzen von $N(\alpha Z)^2$ bis zur 2. Ordnung ergibt

$$E_{nj} \approx m_e c^2 \left\{ \left[1 - \frac{1}{2} N(\alpha Z)^2 + \frac{3}{8} N^2 (\alpha Z)^4 \right] - 1 \right\} \tag{P10.5}$$

$$= \frac{m_e c^2 (\alpha Z)^2}{2} \left[-N + \frac{3}{4} N^2 (\alpha Z)^2 \right] \tag{P10.6}$$

Die Größe N muss ihrerseits ebenfalls nach αZ entwickelt werden. Da E_{nj} bis zur 4. Potenz in αZ entwickelt werden soll, genügt eine Entwicklung von N bis zur 2. Potenz von αZ. Aus Gl. P10.3 folgt somit

$$N = \left[n - j - 1/2 + (j + 1/2) \left(1 - \frac{(\alpha Z)^2}{(j + 1/2)^2} \right)^{1/2} \right]^{-2} \tag{P10.7}$$

$$\approx \left[n - j - 1/2 + (j + 1/2) \left(1 - \frac{1}{2} \frac{(\alpha Z)^2}{(j + 1/2)^2} \right) \right]^{-2} \tag{P10.8}$$

$$= \left[n - \frac{(\alpha Z)^2}{2(j + 1/2)} \right]^{-2} = \frac{1}{n^2} \left[1 - \frac{(\alpha Z)^2}{2n(j + 1/2)} \right]^{-2} \tag{P10.9}$$

$$\approx \frac{1}{n^2} \left[1 + \frac{(\alpha Z)^2}{n(j + 1/2)} \right] \tag{P10.10}$$

Bis zur 2. Potenz von αZ ist demnach

$$N^2 \approx \frac{1}{n^4} \left[1 + 2 \frac{(\alpha Z)^2}{n(j + 1/2)} \right] \tag{P10.11}$$

Einsetzen von Gl. P10.10 und Gl. P10.11 in Gl. P10.6 ergibt demnach bis zur 4. Potenz von αZ

$$E_{nj} \approx \frac{m_e c^2 (\alpha Z)^2}{2} \left\{ -\frac{1}{n^2} \left[1 + \frac{(\alpha Z)^2}{n(j + 1/2)} \right] + \frac{3}{4n^4} (\alpha Z)^2 \right\} \tag{P10.12}$$

$$= -\mathcal{R} \frac{Z^2}{n^2} \left\{ 1 + (\alpha Z)^2 \left[\frac{1}{n(j + 1/2)} - \frac{3}{4n^2} \right] \right\} \tag{P10.13}$$

$$= E_n \left\{ 1 + (\alpha Z)^2 \left[\frac{1}{n(j + 1/2)} - \frac{3}{4n^2} \right] \right\} \tag{P10.14}$$

mit der Rydberg-Konstanten

$$\mathcal{R} = \frac{m_e c^2 \alpha^2}{2} = \frac{m_e c^2}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c} \right)^2 = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} \tag{P10.15}$$

und der Bohrschen Bindungsenergie in einem Zustand mit Hauptquantenzahl n

$$E_n = -\mathcal{R} \frac{Z^2}{n^2} \tag{P10.16}$$

Für die durch die Feinstruktur bedingte Energieverschiebung folgt mit Gl. P10.14

$$E_{nj} - E_n = E_n (\alpha Z)^2 \left(\frac{1}{n(j + 1/2)} - \frac{3}{4n^2} \right) = \frac{E_n}{n} (\alpha Z)^2 \left(\frac{1}{(j + 1/2)} - \frac{3}{4n} \right) \tag{P10.17}$$

Dies war zu zeigen.

Aufgabe P10.2

Zeigen Sie, dass mit den Dirac-Matrizen $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ und β sowie mit der Einheitsmatrix I folgende Beziehung gilt

$$\left(c\vec{\alpha}\cdot\vec{p}+\beta m_0c^2\right)^2 = I\left[c^2p^2+(m_0c^2)^2\right] \tag{P10.18}$$

Hinweise:

$$\beta = \begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix} \quad \text{und} \quad I = \begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix} \tag{P10.19}$$

$$\alpha_i = \begin{pmatrix}0&\sigma_i\\\sigma_i&0\end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix} \tag{P10.20}$$

Lösung

Ausmultiplizieren der linken Seite von Gl. P10.18 ergibt

$$\begin{aligned}
&(c\vec{\alpha}\cdot\vec{p}+\beta m_0c^2)(c\vec{\alpha}\cdot\vec{p}+\beta m_0c^2)\\
&= c^2\left(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}\right)^2 + m_0c^3\left(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}\beta+\beta\vec{\alpha}\cdot\vec{p}\right) + \beta\beta(m_0c^2)^2\\
&= c^2\left(p_x\alpha_1+p_y\alpha_2+p_z\alpha_3\right)^2 + m_0c^3\left[p_x(\alpha_1\beta+\beta\alpha_1)+p_y(\alpha_2\beta+\beta\alpha_2)+p_z(\alpha_3\beta+\beta\alpha_3)\right] + \beta^2m_0^2c^4\\
&= c^2\left[p_x^2\alpha_1\alpha_1+p_y^2\alpha_2\alpha_2+p_z^2\alpha_3\alpha_3+p_xp_y(\alpha_1\alpha_2+\alpha_2\alpha_1)+p_yp_z(\alpha_2\alpha_3+\alpha_3\alpha_2)+p_zp_x(\alpha_3\alpha_1+\alpha_1\alpha_3)\right]\\
&\quad +m_0c^3\left[p_x(\alpha_1\beta+\beta\alpha_1)+p_y(\alpha_2\beta+\beta\alpha_2)+p_z(\alpha_3\beta+\beta\alpha_3)\right]+\beta^2m_0^2c^4
\end{aligned} \tag{P10.21}$$

Man rechnet leicht nach, dass

$$\beta\beta = I \tag{P10.22}$$

$$\beta\alpha_i = \begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&\sigma_i\\\sigma_i&0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0&-\sigma_i\\\sigma_i&0\end{pmatrix} \tag{P10.23}$$

$$\alpha_i\beta = \begin{pmatrix}0&\sigma_i\\\sigma_i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0&\sigma_i\\-\sigma_i&0\end{pmatrix} \tag{P10.24}$$

$$\alpha_i\beta+\beta\alpha_i = 0 \tag{P10.25}$$

$$\alpha_i\alpha_j = \begin{pmatrix}0&\sigma_i\\\sigma_i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&\sigma_j\\\sigma_j&0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\sigma_i\sigma_j&0\\0&\sigma_i\sigma_j\end{pmatrix} \tag{P10.26}$$

Insbesondere ist für $i = 1,2,3$

$$\alpha_i\alpha_i = \begin{pmatrix}\sigma_i^2&0\\0&\sigma_i^2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix} = I \tag{P10.27}$$

Schließlich folgt mit $\sigma_i\sigma_j+\sigma_j\sigma_i = 0$ (leicht nachzurechnen) aus Gl. P10.26, dass $\alpha_i\alpha_j+\alpha_j\alpha_i = 0$.

Damit sind alle Terme in Gl. P10.21 entweder Null oder proportional zur Einheitsmatrix I.

Insgesamt ist also

$$\left(c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_0 c^2\right)^2 = c^2(p_x^2 I + p_y^2 I + p_z^2 I) + m_0^2 c^4 I = I\left[c^2 p^2 + (m_0 c^2)^2\right] \qquad \text{(P10.28)}$$

Dies war zu zeigen.