$$\psi(r,\theta,\varphi) = \begin{pmatrix} g(r) & Y^{l=j-\frac{k}{2}}_{j,m_j}(\theta,\varphi) \\ f(r) & Y^{l=j+\frac{k}{2}}_{j,m_j}(\theta,\varphi) \end{pmatrix} \qquad Y^{l}_{j=l\pm\frac{1}{2},m_j} = \begin{pmatrix} \sqrt{\dots} & Y_{l,m_j-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\dots} & Y_{l,m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

$k = \pm 1$

$$J^2 \psi = \hbar^2 j(j+1)\psi$$

$$J_z \psi = \hbar m_j \psi$$

$$P \psi = (-1)^{j-\frac{k}{2}} \psi$$

$$\boxed{\begin{aligned} (E - mc^2 - V(r))\, g(r) &= i c\hbar\left(\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r}\left(k(j+\tfrac{1}{2})+1\right) f\right) \\ (E + mc^2 - V(r))\, f(r) &= i c\hbar\left(\frac{\partial g}{\partial r} - \frac{1}{r}\left(k(j+\tfrac{1}{2})-1\right) g\right) \end{aligned}}$$

Coulomb-Potential (Z-fach geladener Kern)

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} = -\hbar c \frac{Z\alpha}{r}$$

Feinstrukturkonstante $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,\dots}$

ersetze $f = i\frac{F}{r}$ $\quad g = \frac{G}{r}$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} \left(E - mc^2 + \frac{Z\alpha}{r}\hbar c\right) G &= -\hbar c\left(\frac{\partial F}{\partial r} + \frac{k(j+\frac{1}{2})}{r} F\right) \\ \left(E + mc^2 + \frac{Z\alpha}{r}\hbar c\right) F &= \hbar c\left(\frac{\partial G}{\partial r} - \frac{k(j+\frac{1}{2})}{r} G\right) \end{aligned}}$$

Skizze der weiteren Lösungen (siehe Schwabl)

- Suche gebundene Zustände $E < mc^2$
- Weiter mit Potenzreihenansatz in dimensionslosem

$$\rho = r\frac{\sqrt{m^2c^4 - E^2}}{\hbar c} \qquad \boxed{G(\rho) = \rho^s(a_0 + a_1\rho + \dots)e^{-\rho}}$$

Verhalten am Ursprung

Verhalten bei ∞

$$\boxed{F(\rho) = \rho^s(b_0 + b_1\rho + \dots)e^{-\rho}} \quad \text{mit } a_0, b_0 \neq 0$$

- Einsetzen $\Rightarrow$ Rekursionsformeln für a_ν und b_ν

$$\left(s + \nu + k(j+\tfrac{1}{2})\right) b_\nu - b_{\nu-1} + Z\alpha\, a_\nu - \sqrt{\frac{m-E}{m+E}}\, a_{\nu-1} = 0$$

$$\left(s + \nu - k(j+\tfrac{1}{2})\right) a_\nu - a_{\nu-1} - Z\alpha\, b_\nu - \sqrt{\frac{m-E}{m+E}}\, b_{\nu-1} = 0$$

für $\nu = 0$

$$\boxed{\begin{aligned} \left(s + k(j+\tfrac{1}{2})\right) b_0 + Z\alpha\, a_0 &= 0 \\ \left(s - k(j+\tfrac{1}{2})\right) a_0 - Z\alpha\, b_0 &= 0 \end{aligned}}$$

Ein Lgs mit nicht-trivialer Lösung $a_0, b_0 \neq 0$

für $\det(\dots) = 0 \Rightarrow \underline{s} = \cancel{\pm}\sqrt{k^2(j+\tfrac{1}{2})^2 - Z^2\alpha^2}$

– nicht sinnvoll als Lösung

wenn es Atome gäbe mit $Z > 137 \Rightarrow s$ imaginär

- Rekursionsformel $a_\nu, b_\nu \longrightarrow a_{\nu+1}, b_{\nu+1}$

im Allgemeinen ∞-Reihe, die stärker als e^{ρ} divergiert

Für spezielle Fälle bricht die Reihe ab bei $\nu = N+1$, $N = 0,1,2\ldots$

weil $a_{N+1} = b_{N+1} = 0 \Rightarrow b_N + \sqrt{\frac{m-E}{m+E}}\, a_N = 0$

$\Rightarrow$ normierbare Lösung für ψ

$$\boxed{E = mc^2\left(1+\frac{Z^2\alpha^2}{(s+N)^2}\right)^{-\frac{1}{2}}}$$ (Herleitung Schwabl)

für $N \geq 1$ sind alle j erlaubt und beide Paritäten $k = \pm 1$

für $N = 0$ ist nur $k = +1$ erlaubt

Def Hauptquantenzahl $n = N + j + \frac{1}{2} = 1, 2, 3, \ldots$

- Für gegebenes N sind die möglichen Werte von $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots, n - \frac{1}{2}$
- Für $j < n - \frac{1}{2} \to k = \pm 1$ erlaubt

  Für $j = n - \frac{1}{2} \to k = +1$ erlaubt

$$\Rightarrow \boxed{E = mc^2\left(1+\frac{Z^2\alpha^2}{(n-(j+\frac{1}{2})+\sqrt{(j+\frac{1}{2})^2 - Z^2\alpha^2}}\right)^{-\frac{1}{2}}}$$

hängt ab von n, auch von j

- Entwickle E in α (für Teilchen, obere 2 Komponenten von ψ relevant)

$$E \approx mc^2\left(1 - \frac{1}{2}\frac{Z^2\alpha^2}{n^2} - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^3}\left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right) + \mathcal{O}\left((Z\alpha)^6\right)\right)$$

$$\boxed{\frac{mc^2\alpha^2}{2} = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 1\,Ry}$$

Relativ-Korrektur hebt Entartung der nichtrelativ. Theorie teilweise auf

= „Feinstruktur“

$j = l \pm \frac{1}{2}$ (Teilchen)

Erlaubte Werte

n	j	k	l	m_j	$n\,l_j$ (Bezeichnung)	
1	$\frac{1}{2}$	1	0	$\pm\frac{1}{2}$	$1S_{\frac{1}{2}}$	
2	$\frac{1}{2}$	1	0	$\pm\frac{1}{2}$	$2S_{\frac{1}{2}}$	} bleibt entartet
	$\frac{1}{2}$	-1	1	$\pm\frac{1}{2}$	$2P_{\frac{1}{2}}$	
	$\frac{3}{2}$	1	1	$\pm\frac{3}{2}$, $\pm\frac{1}{2}$	$2P_{\frac{3}{2}}$	Entartung aufgehoben
3	$\frac{1}{2}$	1	0	$\vdots$	$3S_{\frac{1}{2}}$	} noch entartet
	$\frac{1}{2}$	-1	1		$3P_{\frac{1}{2}}$	
	$\frac{3}{2}$	1	1		$3P_{\frac{3}{2}}$	} entartet
	$\frac{3}{2}$	-1	2		$3D_{\frac{3}{2}}$	
	$\frac{5}{2}$	1	2	$\pm\frac{5}{2}$, $\pm\frac{3}{2}$, $\pm\frac{1}{2}$	$3D_{\frac{5}{2}}$	

$E_{2P_{\frac{3}{2}}} - E_{2S_{\frac{1}{2}}} \hat{=} 10950\,\text{MHz}$

war 0 im nichtrel. Grenzfall

6.9 Foldy – Wouthuysen – Transformation

Herleitung relativ. Korrekturen, z.B. Spin-Bahn-Kopplung

Vierer Spinor $\begin{cases} 2 \text{ Komponenten für Teilchen} \\ \text{„große Komp."} \\ 2 \text{ Komponenten für Antiteilchen} \\ \text{„kleine Komp."} \end{cases}$ gekoppelt durch

$\vec{\alpha}\cdot\vec{p}$ im H.O. " $\alpha^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix}$ nebendiagonal in Teilchen–AT-Raum
Antiteilchen

F-W-Trafo macht H (approximativ) blockdiagonal

Beispiel freie Teilchen $\boxed{H = \vec{\alpha}\vec{p} + \beta m}$ für $\hbar = c = 1$

$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi \xrightarrow[\text{unitäre Trafo}]{} \psi = e^{-iS}\psi'$

$i\frac{\partial}{\partial t}\psi' = H'\psi'$ mit $H' = e^{iS}He^{-iS} - e^{iS}(i\partial_t e^{-iS})$

- In Analogie zur Diagonalisierung des Hamiltonop. $H = B_x\sigma_x + B_z\sigma_z$
  Drehung erzeugt durch $e^{iS} = e^{i\sigma_y\vartheta} \Longrightarrow H = \sqrt{B_x^2 + B_z^2}\,\sigma_z$

Ansatz $e^{\pm iS} = \exp[\pm\beta \frac{\vec{\alpha}\cdot\vec{p}}{|\vec{p}|}\vartheta] = \cos\vartheta \pm \beta\frac{\vec{\alpha}\vec{p}}{|\vec{p}|}\sin\vartheta$

Es gilt: $(\beta\vec{\alpha}\cdot\vec{p})^2 = -\vec{p}^2$

$H' = e^{iS}He^{-iS} = \vec{\alpha}\cdot\vec{p}\,(\cos 2\vartheta - \frac{m}{|\vec{p}|}\sin 2\vartheta)$

$\quad + \beta m\,(\cos 2\vartheta + \frac{|\vec{p}|}{m}\sin 2\vartheta)$

- für $\tan 2\vartheta = \frac{|\vec{p}|}{m} \Rightarrow \boxed{H' = \beta m\left(\frac{m}{E} + \frac{\vec{p}^2}{mE}\right)}$

$$\boxed{H' = \beta\sqrt{m^2+p^2} = \begin{pmatrix} \sqrt{m^2+p^2}\,\mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\sqrt{m^2+p^2}\,\mathbb{1} \end{pmatrix}}$$

- für kleine ϑ gilt: $iS = \beta\frac{\vec{\alpha}\vec{p}}{|\vec{p}|}\vartheta \approx \beta\frac{\vec{\alpha}\cdot\vec{p}}{2m}$

Teilchen im elektromagnetischen Potential

$$\boxed{H = \vec{\alpha}\cdot(\vec{p} - e\vec{A}) + \beta m + e\phi(\vec{r})}$$

$$= \mathcal{O} + \beta m + \mathcal{E}$$

„odd" = nebendiag. führender Term „even" = diagonal

Transformation mit $iS = \frac{\beta}{2m}\mathcal{O}$ hier: $S(t)$ Komplikation