# Teil A

## 12. Majorana-Fermionen **12 Pkt.**

Verschiedene Darstellungen der Dirac-Matrizen erlauben die Beschreibung von Fermionen mit unterschiedlichen Eigenschaften. In diesem Beispiel wird eine rein imaginäre Darstellung, eine sogenannte *Majorana-Darstellung* betrachtet.

(a) Zeigen Sie, dass eine unitäre Transformation ($U^\dagger = U^{-1}$) (1 Pkt.)

$$\gamma_M^\mu = U\gamma^\mu U^\dagger \tag{12.1}$$

die Dirac-Matrizen wieder in Dirac-Matrizen überführt, d.h., dass auch die $\gamma_M^\mu$ die definierenden Antikommutator-Relationen erfüllen.

(b) Wie transformiert sich dabei die durch (3 Pkt.)

$$C^{-1}\gamma^\mu C = -\gamma^{\mu\,T} \tag{12.2}$$

definierte Ladungskonjugationsmatrix?
*Hinweis:* Sie sollten nicht einfach annehmen $C_M = UCU^\dagger$. Drücken Sie stattdessen die $\gamma^\mu$-Terme in der Gleichung durch ihre Transformierten aus und versuchen Sie die Gleichung auf dieselbe Form zu bringen wie mit den untransformierten Dirac-Matrizen. Sie sollten dann $C_M = UCU^T$ als Transformationsgesetz für die Matrizen $C$ und $C^{-1}$ erhalten.

(c) Zeigen Sie, dass bei einer Transformation mit (3 Pkt.)

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma^0\left(\mathbb{1} + \gamma^2\right) \tag{12.3}$$

aus der Standarddarstellung der Dirac-Matrizen die Darstellung

$$\begin{aligned}
\gamma_M^0 &= \gamma^0\gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix} \qquad & \gamma_M^1 &= \gamma^2\gamma^1 = \begin{pmatrix} \mathrm{i}\sigma_3 & 0 \\ 0 & \mathrm{i}\sigma_3 \end{pmatrix} \\
\gamma_M^2 &= -\gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix} \qquad & \gamma_M^3 &= \gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} -\mathrm{i}\sigma_1 & 0 \\ 0 & -\mathrm{i}\sigma_1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{12.4}$$

wird. Diese Darstellung ist rein imaginär, es gilt $\left(\gamma_M^\mu\right)^* = -\gamma_M^\mu$.

(d) Man zeige, dass mit dieser Darstellung die Dirac-Gleichung für ein freies Teilchen eine reelle Gleichung ist und dass mit $\psi_M$ auch $\psi_M^*$ Lösung ist. (1 Pkt.)

(e) Verifizieren Sie anhand von (12.2), dass $C = \gamma^2\gamma^0$ eine legitime Ladungskonjugationsmatrix ist. Bestimmen Sie die Ladungskonjugationsmatrix $C_M$ in der neuen Darstellung unter Verwendung der in (b) abgeleiteten Formel. (3 Pkt.)

(f) Der adjungierte Spinor $\bar\psi$ ist definiert durch $\bar\psi = \psi^\dagger\gamma^0$ (ist also nicht einfach der zum Spaltenvektor $\psi$ adjungierte Zeilenvektor $\psi^\dagger$). Ferner ist der ladungskonjugierte Spinor durch $\psi^c = C\bar\psi^T$ gegeben. Zeigen Sie, dass in der neuen Darstellung gilt: (1 Pkt.)

$$\psi_M^c = \eta_c\psi_M^*\,, \tag{12.5}$$

wobei $\eta_c$ eine (irrelevante) Phase ist.

Es folgt, dass eine reelle Lösung $\psi_M$ der Dirac-Gleichung in Majorana-Darstellung ihre eigene Ladungskonjugierte ist. Ein solches Majorana-Fermion ist damit sein eigenes Antiteilchen.

**Lösung:**

(a) Die definierende Eigenschaft der Dirac-Matrizen ist $[\gamma^\mu, \gamma^\nu]_+ = 2g^{\mu\nu}\,\mathbb{1}$. Betrachten wir also den Antikommutator der transformierten Matrizen:

$$[\gamma^\mu_M, \gamma^\nu_M]_+ = U\gamma^\mu \underbrace{U^\dagger U}_{\mathbb{1}} \gamma^\nu U^\dagger + U\gamma^\nu \underbrace{U^\dagger U}_{\mathbb{1}} \gamma^\mu U^\dagger = U\left(\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu\right)U^\dagger$$
$$= 2g^{\mu\nu} UU^\dagger = 2g^{\mu\nu}\,\mathbb{1}\,.$$

Damit haben auch die transformierten Dirac-Matrizen die definierende Eigenschaft.

(b) Wir drücken die untransformierten Größen durch die transformierten aus, um die Transformationseigenschaft der Ladungskonjugation zu bestimmen. Wir haben

$$\gamma^\mu = U^\dagger \gamma^\mu_M U\,,$$

was mit (12.2) liefert:

$$C^{-1}U^\dagger\gamma^\mu_M UC = -\left(U^\dagger\gamma^\mu_M U\right)^T = -U^T\left(\gamma^\mu_M\right)^T\left(U^\dagger\right)^T = -U^T\left(\gamma^\mu_M\right)^T U^*\,. \tag{12.6}$$

Ferner gelten:

$$\begin{aligned} U^\dagger U &= \mathbb{1} &\quad\Rightarrow\quad& U^T\left(U^\dagger\right)^T = \mathbb{1} &\quad& U^T U^* = \mathbb{1}\,,\\ UU^\dagger &= \mathbb{1} &\quad\Rightarrow\quad& &\quad& U^* U^T = \mathbb{1}\,, \end{aligned}$$

also $U^* = \left(U^T\right)^{-1}$. Multiplizieren wir nun (12.6) von links mit $U^*$ und von rechts mit $U^T$:

$$U^* C^{-1} U^\dagger \gamma^\mu_M \underbrace{UCU^T}_{\equiv C_M} = -\left(\gamma^\mu_M\right)^T\,. \tag{12.7}$$

Berechnen wir $C_M^{-1}$:

$$C_M^{-1} = \left(UCU^T\right)^{-1} = U^* C^{-1} U^\dagger\,,$$

was gerade die Matrix ist, die in (12.7) $\gamma^\mu_M$ von links multipliziert. Die Gleichung nimmt also die Form

$$C_M^{-1}\gamma^\mu_M C_M = -\left(\gamma^\mu_M\right)^T \tag{12.8}$$

an, ist somit formgleich mit (12.2). Deshalb ist das Transformationsgesetz für die Ladungskonjugationsmatrix

$$C_M = UCU^T\,. \tag{12.9}$$

(c) Diese Behauptungen sind direkt nachzurechnen. Die Standarddarstellung der Dirac-Matrizen lautet:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \qquad \gamma^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ -\sigma_k & 0 \end{pmatrix}, \qquad k = 1\ldots 3\,,$$

worin die $\sigma_k$ die paulischen Spinmatrizen sind. Wir benötigen für die Rechnung die Adjungierte von $U$:

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma^0\left(\mathbb{1}+\gamma^2\right) \quad \Rightarrow \quad U^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathbb{1}-\gamma^2\right)\gamma^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma^0\left(\mathbb{1}+\gamma^2\right) = U\,,$$

und welche Darstellung die nützlichere ist, ergibt sich jeweils aus dem Kontext.

$$\gamma_M^0 = U\gamma^0U^\dagger = \frac{1}{2}\gamma^0\left(\mathbb{1}+\gamma^2\right)\underbrace{\left(\gamma^0\right)^2}_{\mathbb{1}}\left(\mathbb{1}+\gamma^2\right) = \frac{1}{2}\gamma^0\left(\mathbb{1}+2\gamma^2+\underbrace{\left(\gamma^2\right)^2}_{-\mathbb{1}}\right)$$

$$= \gamma^0\gamma^2 = \begin{pmatrix}\mathbb{1} & 0\\ 0 & -\mathbb{1}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & \sigma_2\\ -\sigma_2 & 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & \sigma_2\\ \sigma_2 & 0\end{pmatrix}$$

$$\gamma_M^1 = U\gamma^1U^\dagger = \frac{1}{2}\gamma^0\left(\mathbb{1}+\gamma^2\right)\gamma^1\left(\mathbb{1}-\gamma^2\right)\gamma^0 = \frac{1}{2}\gamma^0\underbrace{\left(\mathbb{1}+\gamma^2\right)^2}_{2\gamma^2}\gamma^1\gamma^0$$

$$= \underbrace{\left(\gamma^0\right)^2}_{\mathbb{1}}\gamma^2\gamma^1 = \gamma^2\gamma^1 = \begin{pmatrix}0 & \sigma_2\\ -\sigma_2 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & \sigma_1\\ -\sigma_1 & 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\mathrm{i}\sigma_3 & 0\\ 0 & \mathrm{i}\sigma_3\end{pmatrix}$$

$$\gamma_M^2 = U\gamma^2U^\dagger = \frac{1}{2}\gamma^0\left(\mathbb{1}+\gamma^2\right)\gamma^2\left(\mathbb{1}-\gamma^2\right)\gamma^0 = \frac{1}{2}\gamma^0\underbrace{\left(\mathbb{1}+\gamma^2\right)\left(\gamma^2+\mathbb{1}\right)}_{2\gamma^2}\gamma^0$$

$$= -\underbrace{\left(\gamma^0\right)^2}_{\mathbb{1}}\gamma^2 = -\gamma^2 = \begin{pmatrix}0 & -\sigma_2\\ \sigma_2 & 0\end{pmatrix}$$

$$\gamma_M^3 = U\gamma^3U^\dagger = \frac{1}{2}\gamma^0\left(\mathbb{1}+\gamma^2\right)\gamma^3\left(\mathbb{1}-\gamma^2\right)\gamma^0 = \frac{1}{2}\gamma^0\underbrace{\left(\mathbb{1}+\gamma^2\right)^2}_{2\gamma^2}\gamma^3\gamma^0$$

$$= \underbrace{\left(\gamma^0\right)^2}_{\mathbb{1}}\gamma^2\gamma^3 = \gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix}0 & \sigma_2\\ -\sigma_2 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & \sigma_3\\ -\sigma_3 & 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\mathrm{i}\sigma_1 & 0\\ 0 & -\mathrm{i}\sigma_1\end{pmatrix}$$

Dass diese Darstellung rein imaginär ist, folgt daraus, dass die nicht verschwindenden Elemente von $\sigma_2$ alle imaginär sind, die von $\sigma_1$ und $\sigma_3$ aber alle reell.

(d) Dirac-Gleichung: $\left(\gamma^\mu \mathrm{i}\hbar\partial_\mu - mc\right)\psi = 0\,.$
Transformation mit $U$:

$$U\left(\gamma^\mu \mathrm{i}\hbar\partial_\mu - mc\right)U^\dagger\underbrace{U\psi}_{\psi_M} = 0\,,$$

$$\left(\gamma_M^\mu \mathrm{i}\hbar\partial_\mu - mc\right)\psi_M = 0 \qquad \text{(selbe Form)}\,.$$

Komplexe Konjugation unter Berücksichtigung von $\left(\gamma_M^\mu\right)^* = -\gamma_M^\mu$ liefert:

$$\left[\left(\gamma_M^\mu\right)^*\left(-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu\right) - mc\right]\psi_M^* = 0\,,$$

$$\left(\gamma_M^\mu \mathrm{i}\hbar\partial_\mu - mc\right)\psi_M^* = 0\,,$$

d.h., $\psi_M^*$ erfüllt dieselbe Differentialgleichung wie $\psi_M$, nämlich die transformierte Version der Dirac-Gleichung.

(e) $C = \gamma^2\gamma^0 \quad \Rightarrow \quad C^{-1} = -\gamma^0\gamma^2 = \gamma^2\gamma^0 = C$

$$C^\dagger = \left(\gamma^0\right)^\dagger \left(\gamma^2\right)^\dagger = \gamma^0\left(-\gamma^2\right) = \gamma^2\gamma^0 = C$$

Im Folgenden müssen wir einfach verifizieren, dass (12.2) erfüllt ist ($\sigma_1^T = \sigma_1$, $\sigma_2^T = -\sigma_2, \sigma_3^T = \sigma_3$):

$$C^{-1}\gamma^0 C = \gamma^2 \underbrace{\gamma^0\gamma^0}_{\mathbb{1}} \gamma^2\gamma^0 = -\gamma^0 = -\left(\gamma^0\right)^T ,$$

$$C^{-1}\gamma^1 C = -\gamma^2\gamma^0 \underbrace{\gamma^1\gamma^0}_{-\gamma^0\gamma^1} \gamma^2 = \gamma^2\gamma^1\gamma^2 = \underbrace{-\left(\gamma^2\right)^2}_{\mathbb{1}} \gamma^1 = \gamma^1 = -\left(\gamma^1\right)^T ,$$

$$C^{-1}\gamma^2 C = \gamma^2\gamma^0 \underbrace{\gamma^2\gamma^2}_{-\mathbb{1}} \gamma^0 = -\gamma^2 \underbrace{\left(\gamma^0\right)^2}_{\mathbb{1}} = -\gamma^2 = -\left(\gamma^2\right)^T ,$$

$$C^{-1}\gamma^3 C = -\gamma^2\gamma^0 \underbrace{\gamma^3\gamma^0}_{-\gamma^0\gamma^3} \gamma^2 = \gamma^2\gamma^3\gamma^2 = \underbrace{-\left(\gamma^2\right)^2}_{\mathbb{1}} \gamma^3 = \gamma^3 = -\left(\gamma^3\right)^T .$$

Im transformierten System ist die Ladungskonjugationsmatrix nach (12.9)

$$C_M = UCU^T = \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma^0\left(\mathbb{1}+\gamma^2\right)\gamma^2\gamma^0 \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{\left(\mathbb{1}+\gamma^2\right)^T}_{\mathbb{1}+\gamma^2} \underbrace{\left(\gamma^0\right)^T}_{\gamma^0}$$

$$= \frac{1}{2}\gamma^0\left(\mathbb{1}+\gamma^2\right)\gamma^2\left(\mathbb{1}-\gamma^2\right) = \frac{1}{2}\gamma^0\left(\mathbb{1}+\gamma^2\right)\left(\gamma^2+\mathbb{1}\right) = \gamma^0\gamma^2 = \gamma_M^0 ,$$

$$C_M = \gamma_M^0 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix} = C_M^{-1} \qquad (= -C).$$

Die Darstellung mittels $\gamma_M^0$ folgt aus Teilaufgabe (c).

(f) Die Aussage lässt sich durch direktes Nachrechnen zeigen.

$$\psi_M^c = C_M \bar{\psi}_M^T = \gamma_M^0 \left(\psi_M^\dagger \gamma_M^0\right)^T = \gamma_M^0 \underbrace{\left(\gamma_M^0\right)^T}_{\gamma_M^0} \underbrace{\left(\psi_M^\dagger\right)^T}_{\psi_M^*} = \psi_M^* .$$

Wir erhalten sogar Gleichheit! Allerdings ist der Ladungskonjugationsoperator nur bis auf einen Phasenfaktor definiert. Offensichtlich gilt $C^{-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha} A \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} C = C^{-1}AC$ für jeden Operator $A$, d.h. $C$ und $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}C \equiv \eta_c C$ können beide als Ladungskonjugatiosmatrix gewählt werden. Damit ergibt sich die etwas schwächere Behauptung $\psi_M^c = \eta_c \psi_M^*$.

*Anmerkung:* Warum wird der adjungierte Spinor mit einem Faktor $\gamma^0$ definiert? Betrachten wir die Adjungierte der Dirac-Gleichung:

$$\psi^\dagger \left[ \underbrace{\gamma^{\mu\dagger}}_{\gamma^0\gamma^\mu\gamma^0} \left(-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu\right) - mc \right] = 0 ,$$

$$\underbrace{\psi^\dagger\gamma^0}_{\bar{\psi}} \left[\gamma^\mu\left(-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu\right) - mc\right]\gamma^0 = 0 .$$

Durch Rechtsmultiplikation mit $\gamma^0$ entfernen wir diesen Faktor. Der adjungierte Spinor erfüllt also die Gleichung, die man durch „Adjunktion ohne Veränderung der Gamma-Matrizen“ erhielte. Das das Problem ist, dass die Gamma-Matrizen (im Gegensatz zu den Alpha-Matrizen in der ersten Variante der Dirac-Gleichung) nicht selbstadjungiert sind. Adjunktion ist äquivalent zur Multiplikation mit $\gamma^0$ von links und rechts. Durch Hereinnahme der Matrix $\gamma^0$ in die Definition des adjungierten Spinors kann man diesen „unerwünschten“ Effekt ausgleichen.

Transponieren wir nun die Gleichung, um wieder auf Spaltenform zu kommen und ersetzen $(\gamma^\mu)^T$ durch $-C^{-1}\gamma^\mu C$:

$$\begin{aligned}
&\left[(\gamma^\mu)^T\left(-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu\right) - mc\right]\bar{\psi}^T = 0\,,\\
\Rightarrow\quad & C^{-1}\left(\gamma^\mu \mathrm{i}\hbar\partial_\mu - mc\right)\underbrace{C\bar{\psi}^T}_{\psi^c} = 0\,,\\
&\left(\gamma^\mu \mathrm{i}\hbar\partial_\mu - mc\right)\psi^c = 0\,.
\end{aligned}$$

Der ladungskonjugierte Spinor erfüllt also im feldfreien Fall die ursprüngliche Dirac-Gleichung (mit Feld würde er sie nach Ersetzen der Ladung durch ihr Negatives erfüllen).

Die Lösungen zu den Aufgaben im Teil A werden zu dem unten genannten Termin hochgeladen.

## Teil B

**9. Relativistische Eigenenergien des Wasserstoffatoms** **7 Pkt.**

(a) Entwickeln Sie die Sommerfeldformel für die Berechnung der Energieeigenwerte des relativistischen Wasserstoffatoms (4 Pkt.)

$$E_{n,j} = \frac{mc^2}{\sqrt{1+\left(\frac{\alpha_s}{n-\delta_j}\right)^2}}, \quad \delta_j = j + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(j+\frac{1}{2}\right)^2 - \alpha_s^2}, \qquad \alpha_s \approx \frac{1}{137} \tag{9.1}$$

nach Taylor bis einschließlich zur vierten Ordnung in der Feinstrukturkonstante $\alpha_s$. Vergleichen Sie das Ergebnis mit der Näherung

$$E_{n,j} = mc^2\left[1 - \frac{\alpha_s^2}{2n^2} - \frac{\alpha_s^4}{2n^4}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \pm \dots\right)\right] \tag{9.2}$$

im Skript.

(b) Berechnen Sie die numerischen Werte (in eV) der relativistischen Korrektur zu den Eigenenergien des Wasserstoffatoms mit Hauptquantenzahlen $n = 1$ und $n = 2$. Verwenden Sie dabei die genäherte (9.2) sowie die exakte Lösung (9.1). Vergleichen Sie die numerischen Ergebnisse. (3 Pkt.)

**Lösung:**

(a) Die Sommerfeldformel lautet

$$\frac{E_{n,j}}{mc^2} = \frac{1}{\sqrt{1+g(\alpha_s)}}$$

wobei

$$g(\alpha_s) = \frac{\alpha_s^2}{\Big(n - \delta_j(\alpha_s)\Big)^2} \quad \text{und} \quad \delta_j(\alpha_s) = j + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(j+\frac{1}{2}\right)^2 - \alpha_s^2}.$$

Daraus erkennen wir zunächst $\delta_j(0) = 0$ sowie $g(0) = 0$. Dann ist

$$\frac{E_{n,j}(0)}{mc^2} = 1\,.$$

Für die Taylorentwicklung werden die Ableitungen nach der Feinstrukturkonstante $\alpha_s$ benötigt.

$\underline{\delta_j(\alpha_s):}$

$$\delta_j'(\alpha_s) = \frac{\alpha_s}{\left[\left(j+\frac{1}{2}\right)^2 - \alpha_s^2\right]^{\frac{1}{2}}} \qquad \delta_j'(0) = 0$$

$$\delta_j''(\alpha_s) = \frac{1}{\left[\left(j+\frac{1}{2}\right)^2 - \alpha_s^2\right]^{\frac{1}{2}}} + \frac{\alpha_s^2}{\left[\left(j+\frac{1}{2}\right)^2 - \alpha_s^2\right]^{\frac{3}{2}}} \qquad \delta_j''(0) = \frac{1}{\left(j+\frac{1}{2}\right)}$$

$$\delta_j'''(\alpha_s) = \frac{3\alpha_s}{\left[\left(j+\frac{1}{2}\right)^2 - \alpha_s^2\right]^{\frac{3}{2}}} + \frac{3\alpha_s^3}{\left[\left(j+\frac{1}{2}\right)^2 - \alpha_s^2\right]^{\frac{5}{2}}} \qquad \delta_j'''(0) = 0$$

$\underline{g(\alpha_s):}$

$$g'(\alpha_s) = \frac{2\alpha_s}{(n-\delta_j)^2} + \frac{2\alpha_s^2\delta_j'}{(n-\delta_j)^3} = \underbrace{\frac{2\alpha_s}{(n-\delta_j)^2}}_{u(\alpha_s)}\underbrace{\left(1 + \frac{\alpha_s\delta_j'}{(n-\delta_j)}\right)}_{v(\alpha_s)} \qquad g'(0) = 0$$

Der Übersicht halber schreiben wir nun $g'(\alpha_s) = u(\alpha_s)\cdot v(\alpha_s)$. Wie man oben sieht ist $u(0) = 0$ und $v(0) = 1$. Die weiteren Ableitungen haben dann die Form

$$g'' = u'v + v'u \qquad \text{und} \qquad g''' = u''v + v''u + 2v'u'\,.$$

Wir berechnen $u', v', u''$ und $v''$:

$$u' = \frac{2}{(n-\delta_j)^2} + \frac{4\alpha_s\delta_j'}{(n-\delta_j)^3}, \quad u'' = \frac{8\delta_j'}{(n-\delta_j)^3} + \frac{4\alpha_s\delta_j''}{(n-\delta_j)^3} + \frac{12\alpha_s\delta_j'^2}{(n-\delta_j)^4}$$

$$v' = \frac{\delta_j'}{(n-\delta_j)} + \frac{\alpha_s \delta_j''}{(n-\delta_j)} + \frac{\alpha_s \delta_j'^2}{(n-\delta_j)^2},$$

$$v'' = \frac{2\delta_j''}{(n-\delta_j)} + \frac{2\delta_j'^2}{(n-\delta_j)^2} + \frac{\alpha_s \delta_j'''}{(n-\delta_j)} + \frac{\alpha_s \delta_j' \delta_j''}{(n-\delta_j)^2} + \frac{2\alpha_s \delta_j' \delta_j''}{(n-\delta_j)^2} + \frac{2\alpha_s \delta_j'^3}{(n-\delta_j)^3}$$

und bestimmen ihren Wert für $\alpha_s = 0$

$$\Rightarrow \qquad u'(0) = \frac{2}{n^2}, \qquad u'' = 0, \qquad v'(0) = 0, \qquad v''(0) = \frac{2}{n\left(j+\frac{1}{2}\right)}$$

$$\Rightarrow \qquad g'' = \frac{2}{n^2}, \qquad g'''(0) = 0\,.$$

Für die Näherung der Sommerfeldformel bis zur vierten Ordnung brauchen wir nun auch noch $g^{iv}(0)$:

$$\begin{aligned} g^{iv}(\alpha_s) &= u'''v + u''v' + v'''u + v''u' + 2v''u' + 2v'u'' \\ &= u'''v + v'''u + 3v''u' + 3v'u'' \end{aligned}$$

Hier fallen einige Terme für $\alpha_s = 0$ heraus. Es bleibt

$$g^{iv}(0) = u'''(0) + 3 \cdot \frac{2}{n\left(j+\frac{1}{2}\right)} \cdot \frac{2}{n^2} = u'''(0) + \frac{12}{n^3\left(j+\frac{1}{2}\right)}\,.$$

Die einzige Ableitung, die wir noch bilden müssen ist $u'''(\alpha_s)$. Dabei spielen nur die Terme eine Rolle, bei denen $\delta_j''$ alleine im Zähler steht. Alle andere verschwinden.

$$u'''(\alpha_s) = \frac{12\delta_j''}{(n-\delta_j)^3} + \dots \quad \Rightarrow \quad u'''(0) = \frac{12}{n^3\left(j+\frac{1}{2}\right)}$$

$$\Rightarrow \quad g^{iv}(0) = \frac{24}{n^3\left(j+\frac{1}{2}\right)}$$

<u>$E_{n,j}(\alpha_s)$:</u>

$$\frac{E_{n,j}'}{mc^2} = -\frac{1}{2}\frac{g'}{(1+g)^{\frac{3}{2}}}, \qquad \frac{E_{n,j}''}{mc^2} = -\frac{1}{2}\frac{g''}{(1+g)^{\frac{3}{2}}} + \frac{3}{4}\frac{g'^2}{(1+g)^{\frac{5}{2}}}$$

$$\frac{E_{n,j}'''}{mc^2} = -\frac{1}{2}\frac{g'''}{(1+g)^{\frac{3}{2}}} + \frac{9}{4}\frac{g'g''}{(1+g)^{\frac{5}{2}}} - \frac{15}{8}\frac{g'^3}{(1+g)^{\frac{7}{2}}}$$

Für die vierte Ableitung werden nur noch Terme mit $g''$ und $g^{iv}$ im Zähler berücksichtigt:

$$\frac{E_{n,j}^{iv}}{mc^2} = -\frac{1}{2}\frac{g^{iv}}{(1+g)^{\frac{3}{2}}} + \frac{9}{4}\frac{g''^2}{(1+g)^{\frac{5}{2}}} + \dots$$

Nun ist

$$\frac{E'_{n,j}(0)}{mc^2} = 0, \qquad \frac{E''_{n,j}(0)}{mc^2} = -\frac{1}{2}\frac{2}{n^2} = -\frac{1}{n^2}, \qquad \frac{E'''_{n,j}(0)}{mc^2} = 0$$

$$\frac{E^{iv}_{n,j}(0)}{mc^2} = -\frac{1}{2}\frac{24}{n^3\left(j+\frac{1}{2}\right)} + \frac{9}{4}\left(\frac{2}{n^2}\right)^2 = -\frac{12}{n^3\left(j+\frac{1}{2}\right)} + \frac{9}{n^4}.$$

Für die Taylorentwicklung folgt:

$$\begin{aligned}\frac{E_{n,j}}{mc^2} &\approx 1 + 0 - \frac{1}{2}\frac{\alpha_s^2}{n^2} + 0 + \frac{1}{24}\left(-\frac{12}{n^3\left(j+\frac{1}{2}\right)} + \frac{9}{n^4}\right)\alpha_s^4 + \dots \\ &= 1 - \frac{\alpha_s^2}{2n^2} - \frac{\alpha_s^4}{2n^4}\left(\frac{n}{\left(j+\frac{1}{2}\right)} - \frac{9}{12}\right) + \dots .\end{aligned}$$

Dies entspricht der Näherung im Skript.

*Anmerkung:* Eine erhebliche Vereinfachung ergibt sich hier, wenn man gleich am Anfang feststellt, dass $\alpha_s$ in der Formel nur quadratisch vorkommt und die Entwicklung statt nach $\alpha_s$ nach $y = \alpha_s^2$ durchführt.

Noch einfacher dürfte es werden, wenn man, statt stur Ableitungen der auftretenden Terme auszurechnen, um die formale Darstellung der Taylorreihe benützen zu können, einfach die bekannten Reihen für $1/\sqrt{1+x}$, $1/(n-x)^2 = 1/n^2 + (2nx - x^2)/(n^2(n-x)^2)$ und $A - \sqrt{A^2 - y}$ verwendet.

(b) Zur numerischen Bestimmung der Energieeigenwerte benötigen wir:

$$\alpha_s = 7.297\,652 \cdot 10^{-3} \approx \frac{1}{137}$$

Für $n = 1$ ist $j = \frac{1}{2}$:

$$(1) \quad E^T_{n,j} = mc^2\left[1 - \frac{\alpha_s^2}{2} - \frac{\alpha_s^4}{2}\left(\frac{1}{1} - \frac{3}{4}\right)\right]$$

$$= 8.187\,105\,776\,823\,89 \cdot 10^{-14}\,\mathrm{J}\,\underbrace{\left[1 - \frac{(7.297\,652)^2 \cdot 10^{-6}}{2} - \frac{(7.297\,652)^4 \cdot 10^{-12}}{8}\right]}_{=0.999\,973\,359\,973\,365}$$

$$= 8.186\,887\,672\,107\,92 \cdot 10^{-14}\,\mathrm{J} = 510\,985.336\,970\,526\,\mathrm{eV}$$

$$(2) \quad E_{n,j} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha_s}{1-1+\sqrt{1-\alpha_s^2}}\right)^2}} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{\alpha_s^2}{1-\alpha_s^2}}}$$

$$= \frac{8.187\,105\,776\,823\,89 \cdot 10^{-14}\,\mathrm{J}}{\underbrace{\sqrt{1 + \frac{(7.297\,652)^2 \cdot 10^{-6}}{1 - (7.297\,652)^2 \cdot 10^{-6}}}}_{=1.000\,026\,640\,736\,35}}$$

$$= 8.186\,887\,672\,107\,85 \cdot 10^{-14}\,\mathrm{J} = 510\,985.336\,970\,521\,\mathrm{eV}$$

$$\Delta E = E^T_{n,j} - E_{n,j} = 4.831 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{eV}$$

Für $n = 2$ ist $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$:

$\underline{j = \frac{1}{2}}$

$$(1) \quad E^T_{n,j} = mc^2 \left[1 - \frac{\alpha_s^2}{8} - \frac{\alpha_s^4}{32}\left(\frac{2}{1} - \frac{3}{4}\right)\right]$$

$$= mc^2 \underbrace{\left[1 - \frac{(7.297\,652)^2 \cdot 10^{-6}}{8} - \frac{5 \cdot (7.297\,652)^4 \cdot 10^{-12}}{128}\right]}_{=0.999\,993\,339\,971\,164}$$

$$= 510\,995.546\,728\,422\,\mathrm{eV}$$

$$(2) \quad E_{n,j} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha_s}{2-1+\sqrt{1-\alpha_s^2}}\right)^2}} = \frac{mc^2}{\underbrace{\sqrt{1 + \frac{\alpha_s^2}{\left(1 + \sqrt{1-\alpha_s^2}\right)^2}}}_{=1.000\,006\,660\,073\,20}}$$

$$= 510\,995.546\,728\,420\,\mathrm{eV}$$

$$\Delta E = E^T_{n,j} - E_{n,j} = 1.455 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{eV}$$

$\underline{j = \frac{3}{2}}$

$$(1) \quad E^T_{n,j} = mc^2 \underbrace{\left[1 - \frac{\alpha_s^2}{8} - \frac{\alpha_s^4}{32}\left(\frac{2}{2} - \frac{3}{4}\right)\right]}_{=0.999\,993\,340\,059\,873} = 510\,995.546\,773\,752\,\mathrm{eV}$$

$$(2) \quad E_{n,j} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha_s}{2-2+\sqrt{4-\alpha_s^2}}\right)^2}} = \frac{mc^2}{\underbrace{\sqrt{1 + \frac{\alpha_s^2}{4-\alpha_s^2}}}_{=1.000\,006\,659\,984\,48}}$$

$$= 510\,995.\,546\,773\,752\,\mathrm{eV}$$

$$\Delta E = E^T_{n,j} - E_{n,j} = 0.0164 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{eV}$$

Im Teil B können **7 Punkte** erreicht werden. Die Abgabe der Aufgabe(n) bis zum unten genannten Datum bitte per Mail an **antonia.schulz@ovgu.de**.