Pauli-Hamiltonian

$$\underset{\curvearrowright 2\times 2}{\hat{H}^{\text{Pauli}}} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + q\phi - \frac{q}{2m_0 c}\Big(\underbrace{\hat{\underline{L}}}_{\text{Bahndrehimpuls}} + 2\underbrace{\hat{\underline{S}}}_{\text{Spin}}\Big)\cdot\underline{B}$$

Keine direkte Kopplung zw. $\hat{\underline{L}}$ und $\hat{\underline{S}}$

mit $\hat{\underline{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\underline{\sigma}}$ Vektor mit 3 Pauli-Spinmatrizen

heurist. Argument für Spin-Bahn-Kopplung:

Magnetfeld, welches auf das Elektron durch seine Bewegung relativ zum Kern wirkt

$$\underline{B}' = -\frac{1}{r}\phi'(r)\frac{1}{m_0 c^2}\underline{L}$$

Spin koppelt linear an dieses Feld $\longrightarrow$ Kopplung $\hat{\underline{L}}\cdot\hat{\underline{S}}$

Strenge Herleitung: Ausgangspunkt: $\underset{\curvearrowright 4\times 4}{\hat{H}_D} = c\,\underline{\alpha}\cdot\hat{\underline{p}} + \beta m_0 c^2 + \underbrace{q\phi\,\mathbb{1}}_{\text{Kernpotential}}$ $\qquad(\underline{B} = \underline{A} = 0)$

$$\underline{\psi} = \begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\end{pmatrix} = \underbrace{e^{-i/\hbar\, m_0 c^2 t}}_{\text{Abspaltung Ruheenergie}}\begin{pmatrix}\tilde{\varphi}_1\\ \tilde{\varphi}_2\end{pmatrix}, \quad \tilde{\underline{\varphi}}_i(t) = \underbrace{e^{-iEt/\hbar}\,\underline{\varphi}_i(\underline{r})}_{\text{Separationsansatz}}$$

Einsetzen in $i\hbar\frac{\partial\underline{\psi}}{\partial t} = \hat{H}_D\,\underline{\psi}(t)$

$\Rightarrow \dots \Rightarrow$ nach Auflösung bzgl. $\underline{\varphi}_2(\underline{r})$ und Einsetzen in Gl. für $\underline{\varphi}_1(\underline{r})$

siehe letzte Vorlesung

$$\boxed{E\,\underline{\varphi}_1(\underline{r}) = \frac{c\,\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}}{2m_0c^2}\left(\frac{1}{1+\frac{E-q\phi(r)}{2m_0c^2}}\right)c(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\,\underline{\varphi}_1(\underline{r}) + q\phi\,\underline{\varphi}_1(\underline{r})}$$

Gleichung für ~~einen~~ den zweikomponentigen Vektor $\underline{\varphi}_1(\underline{r})$, noch exakt!

Bemerkung: Bei der Herleitung der Pauli-Gl. hatten wir $\frac{E-q\phi}{2m_0c^2} = 0$ gesetzt
(und wir hatten $\hat{\underline{p}} \longrightarrow \hat{\underline{\Pi}} = \hat{\underline{p}} - \frac{q}{c}\underline{A}$)

Jetzt: Wir nehmen wieder an, dass $\frac{\overbrace{E-q\phi}^{\text{Energie mit bereits abgespaltener Ruheenergie}}}{2m_0c^2}$ klein (aber $\neq$ null!)

Taylorentwicklung:

$$(1+x)^m = 1 + mx + \frac{m(m-1)}{2!}x^2 + \mathcal{O}(x^3), \quad m \text{ ganzzahlig oder rational}$$

hier: $m = -1$

$$(1+x)^{-1} \approx 1 - x + x^2 + O(x^3)$$

breche nach dem ersten (linearen) Term ab

$$\circledast \quad \Rightarrow \boxed{E \underline{\varphi}_1 \simeq \frac{1}{2m_0}(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\underbrace{\left(1 - \frac{E - q\phi(\underline{r})}{2m_0c^2}\right)}_{f(\underline{r})}(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\underline{\varphi}_1 + q\phi(\underline{r})\underline{\varphi}_1}$$

Nebenrechnungen:

$$(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})f(\underline{r})(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}) = \left[(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}), f(\underline{r})\right](\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}) + f(\underline{r})(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})^2$$

benutze:

$$(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})^2 = \hat{p}^2 \hat{1} + i\,\hat{\underline{\sigma}}\cdot\underbrace{(\hat{\underline{p}}\times\hat{\underline{p}})}_{0} = \hat{p}^2\hat{1}$$

$$(\hat{\underline{\sigma}}\hat{\underline{p}})^2\underline{\varphi} = \hat{p}^2\hat{1}\underline{\varphi}$$

$$\boxed{\begin{aligned}&(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\underline{A})(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\underline{B})\\ &= \underline{A}\cdot\underline{B}\,\hat{1} + i\hat{\underline{\sigma}}\cdot(\underline{A}\times\underline{B})\end{aligned}}$$

$$\left[(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}), f(\underline{r})\right]\underline{\varphi} = \hat{\underline{\sigma}}\cdot\underbrace{\hat{\underline{p}}(f(\underline{r})\underline{\varphi})}_{\text{Produktregel}} - f(\underline{r})\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}\underline{\varphi}$$

$$= \hat{\underline{\sigma}}\cdot(\hat{\underline{p}}f(\underline{r}))\underline{\varphi} + \cancel{\hat{\underline{\sigma}}f(\underline{r})\hat{\underline{p}}\underline{\varphi}} - \cancel{f(\underline{r})\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}\underline{\varphi}}$$

Ortsdarstellung

$$= \frac{\hbar}{i}\hat{\underline{\sigma}}(\nabla f(\underline{r}))\underline{\varphi}$$

$$\Rightarrow (\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})f(\underline{r})(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}) = f(\underline{r})\hat{p}^2\hat{1} + \frac{\hbar}{i}\hat{\underline{\sigma}}\cdot\nabla f(\underline{r})(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})$$

Kernpotential
≙ Zentralpotential

Erinnerung: $f(\underline{r}) = 1 - \dfrac{E - q\phi(\underline{r})}{2m_0c^2} = f(r)$

$$\Rightarrow \nabla f(\underline{r}) = f'(r)\frac{\underline{r}}{r} \quad \text{mit } f'(r) = \frac{df}{dr}$$

Zwischenergebnis $\rightarrow$

$$= f(\underline{r})\,\hat{p}^2\,\hat{1} + \frac{\hbar}{i} f'(r)\frac{(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\underline{r})}{r}(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})$$

Letzter Schritt:

Formel

$$(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\underline{r})(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}) = \hat{1}\,\underline{r}\cdot\frac{\hbar}{i}\nabla + i\hat{\underline{\sigma}}\cdot\underbrace{(\underline{r}\times\frac{\hbar}{i}\nabla)}$$

Ortsdarstellung des Bahndrehimpulses!

$$\Rightarrow \frac{\hbar}{i} f'(r)\left(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\frac{\underline{r}}{r}\right)(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}) = -\hbar^2\frac{f'(r)}{r}\underline{r}\cdot\frac{\underline{r}}{r}\partial_r + \hbar\frac{f'(r)}{r}\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{L}}$$

$$= -\hbar^2 f'(r)\,\partial_r + \hbar\frac{f'(r)}{r}\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{L}}$$

$$f(r) = \frac{E - q\phi(r)}{2m_0c^2}$$

$$f'(r) = -\frac{q\phi'(r)}{2m_0c^2}$$

Setze alles in die Ausgangsgleichung (*) ein

$$\boxed{E\varphi_1 = \hat{1}\,q\phi\,\varphi_1 + \hat{1}\underbrace{\frac{1}{2m_0}\left(1 - \frac{E-q\phi(r)}{2m_0c^2}\right)}_{a}\hat{p}^2\varphi_1 \underbrace{- \hat{1}\hbar^2\frac{q\phi'(r)}{4m_0^2c^2}\partial_r}_{b}\varphi_1 + \underbrace{\hat{1}\hbar\frac{q\phi'(r)}{4m_0^2c^2 r}\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{L}}}_{c}\,\varphi_1} \quad (**)$$

Bemerkungen

– Im Term c "versteckt sich" bereits die Spin-Bahn-Kopplung!!

denn $\frac{\hbar}{2}\hat{\underline{\sigma}} = \hat{\underline{S}}$ (Spinoperator)

Wir sehen: $\hat{\underline{S}}$ koppelt in c linear an $\hat{\underline{L}}$, wie erwartet!

Vorteil: Hier haben wir die Spin-Bahn-Wechselwirkung systematisch als relativist. Korrektur (erster Ordnung) hergeleitet, statt der früher ~~[illegible]~~ verwendeten semi-klass. Beschreibung

– Zu Term ⓐ : Dieser enthält den Faktor $\left(\frac{E-q\phi}{2m_0c^2}\right)\hat{p}^2$

Durch das Auftauchen von E wird die Gesamtgleichung (**) zu einer <u>impliziten</u> Gleichung!

Ausweg:
Nähere E durch seinen Ausdruck für das "ungestörte" System ohne Relativistik

$$\hat{H}_0\,|\varphi_1^0\rangle = E\,|\varphi_1^0\rangle$$

"0" um anzudeuten, dass hier das ungestörte System betrachtet wird!

$$\underline{\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + q\phi}$$

setze dies für E in den Term ⓐ ein!

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{1}{2m_0}\left(1-\frac{E-q\phi(r)}{2m_0c^2}\right)}_{ⓐ}\hat{p}^2\underline{\varphi}_1 = \frac{\hat{p}^2}{2m_0}\underline{\varphi}_1 - \frac{E-q\phi(r)}{4m_0^2c^2}\hat{p}^2\underline{\varphi}_1$$

$$\approx \frac{\hat{p}^2}{2m_0}\underline{\varphi}_1 - \underline{\frac{\hat{p}^4}{8m_0^3c^2}\underline{\varphi}_1}$$

$$E = \frac{\hat{p}^2}{2m} + q\phi$$

Der Zusatzterm $\sim \hat{p}^4$ ist <u>konsistent</u> mit der Taylor-Entwicklung der relativist. Energie-Impuls-Relation:

$$E = \sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2} = m_0c^2\sqrt{1+\underbrace{\frac{p^2}{m_0^2c^2}}_{x}}\;, \quad x \text{ klein}$$

$$\approx m_0c^2\left(1+\frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^4 + \dots\right)$$

$$= m_0c^2\left(1+\frac{p^2}{2m_0^2c^2} - \frac{1}{8}\left(\frac{p^2}{m_0^2c^2}\right)^2 + \dots\right)$$

$$= m_0c^2 + \frac{p^2}{2m_0} \underbrace{- \frac{1}{8}\frac{p^4}{m_0^3c^2}}_{}$$

entspricht dem Term, den wir über ⓐ hergeleitet haben!

– Jetzt zu Term (b)

$$\underbrace{\frac{-\hbar^2 q\,\phi'(r)}{4 m_0^2 c^2}\,\partial_r}_{\hat{A}}$$

Beachte: $\hat{A}$ ist nicht hermitesch, da kein i im Vorfaktor!

Das ist wohl Resultat der Näherung!!

Erinnerung: Hermitizität des Impulsoperators in 1 Dimension

$$\langle \varphi_1 | \hat{p} | \varphi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_1^*(x) \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \varphi_2(x)$$

$$= \left[\varphi_1^* \varphi_2\right]_{-\infty}^{\infty} - \frac{\hbar}{i}\int dx \left(\frac{\partial}{\partial x}\varphi_1^*(x)\right) \varphi_2(x)$$

Null, da Zustände auf dem "Rand" verschwinden (Normierbarkeit!)

$$= \int dx\, (\hat{p}\varphi_1)^* \varphi_2$$

$$= \langle \hat{p}\varphi_1 | \varphi_2 \rangle$$

"Behebung" $\hat{=}$ Konstruktion eines hermiteschen Terms

Betrachte dazu Erwartungswert

$$\langle \varphi_1 | \hat{A} | \varphi_1 \rangle = \int d\underline{r}\; \varphi_1^*(\underline{r})\, \hat{A}\, \varphi_1(\underline{r})$$

$$\underbrace{\sim \int_0^\infty dr\, r^2\, \varphi_1^*(r) \underbrace{\frac{\partial \phi(r)}{\partial r}}_{\phi'} \partial_r \varphi_1(r)}$$

Symmetrisierung

$$\frac{1}{2}\int dr\, r^2\, \varphi_1^* (\partial_r \phi)(\partial_r \varphi_1) + \underbrace{\frac{1}{2}\int dr\, r^2 (\partial_r \varphi_1^*)(\partial_r \phi)\, \varphi_1}_{\frac{1}{2}\int dr\, (\partial_r \varphi_1^*)\, r^2 (\partial_r \phi)\, \varphi_1}$$

partielle Integration.

Alle Randterme sind Null, da φ_1 dort verschwindet

$$= \frac{1}{2}\int dr\, r^2\, \varphi_1^* (\partial_r \phi)(\partial_r \varphi_1) - \frac{1}{2}\int dr\, \varphi_1^*\, \partial_r \left(r^2 (\partial_r \phi)\, \varphi_1 \right)$$

Produktregel

$$= \frac{1}{2}\int dr \left(\cancel{r^2 \varphi_1^* (\partial_r\phi)(\partial_r \varphi_1)} - \varphi_1^* \left(\partial_r (r^2 \partial_r \phi)\right)\varphi_1 - \cancel{\varphi_1^* r^2 (\partial_r\phi)\partial_r \varphi_1} \right)$$

$$= -\frac{1}{2}\int_0^\infty dr\ \varphi_1^* \partial_r (r^2 \partial_r \phi)\ \varphi_1$$ / erweitern mit $1 = \frac{r^2}{r^2}$

$$= -\frac{1}{2}\int_0 dr\ \varphi_1^* \frac{r^2}{r^2}\left(\partial_r r^2 (\partial_r \phi)\right) \varphi_1$$

Benutze: Laplace in Kugelkoordinaten

$$\Delta \phi \underset{\substack{\uparrow \\ \phi = \phi(r)}}{=} \frac{1}{r^2}\partial_r (r^2 \partial_r \phi)$$

$$= -\frac{1}{2}\int dr\ r^2 \varphi_1^* \Delta \phi\ \varphi_1$$

Erinnerung: $\phi(r)$ ist das durch den Kern erzeugte elektrostatische Potential!

Damit gilt die Poisson-Gleichung (Elektrostatik)

$$\Delta \phi(\underline{r}) = -\frac{\rho_{Kern}(\underline{r})}{\varepsilon_0}$$ Ladungsdichte

$$= +\frac{1}{2\varepsilon_0}\int dr\ r^2 \varphi_1^*(\underline{r})\, \rho_{Kern}(\underline{r})\, \varphi_1(\underline{r})$$ Physikalische Observable!

Erwartungswert des Kernpotentials

Term (b) insgesamt (mit Vorfaktoren und negativem Vorzeichen)

$$(b)\ \underline{\varphi}_1 = -\frac{\hbar^2 q\, \phi'(r)}{4 m_0^2 c^2}\partial_r \underline{\varphi}_1 = -\frac{\hbar^2 q\, \rho_{Kern}(r)}{8 m_0^2 c^2 \varepsilon_0}\, \underline{\varphi}_1$$

bzw. $\rho_{Kern} = -\varepsilon_0 \Delta \phi$

Gesamtergebnis

$$\hat{H}\,|\varphi_1\rangle = E\,|\varphi_1\rangle \qquad \text{Eigenwertgleichung}$$

$$\hat{H} = \underbrace{\underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m_0} + q\,\phi_{Kern}(\underline{r})}_{\text{nicht-relativistischer Anteil}}}_{\hat{H}_0} \underbrace{- \frac{\hat{p}^4}{8m_0^3c^2}}_{\hat{H}^{rel}_{Kin}} \underbrace{- \frac{\hbar^2 q\,\rho_{Kern}(\underline{r})}{8m_0^2c^2\varepsilon_0}}_{\hat{H}^{Darwin}_{rel}} \underbrace{+ \frac{q\,\phi'(r)}{4m_0^2c^2 r}\,\hat{\underline{S}}\cdot\hat{\underline{L}}}_{H^{SB}_{rel}}$$

$\hat{H}^{rel}_{Kin}$: Relativist. Korrektur zur kinet. Energie

$\hat{H}^{Darwin}_{rel}$: „Darwin-Term"

H^{SB}_{rel}: Spin-Bahn-Wechselwirkung!

Welche Interpretation hat der Darwin-Term $\left(\sim \rho_{Kern}(\underline{r}) = -\Delta\phi(\underline{r})\,\varepsilon_0\right)$

Physikal. Idee: Das Elektron führt in Richtung seiner Bewegung eine „Zitterbewegung" aus $\Rightarrow$ „Abtasten des Kernpotentials"