Nicht-relativistische Korrekturen

Ansatz $\underline{\Psi} = \begin{pmatrix} \underline{\varphi}_1 \\ \underline{\varphi}_2 \end{pmatrix}$, $\underline{\varphi}_i = e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} \begin{pmatrix} \underline{\tilde{\varphi}}_1 \\ \underline{\tilde{\varphi}}_2 \end{pmatrix}$

setze dies in die Dirac-Gl. im elektromagnet. Feld

a) Einfachste Näherung

$$\underbrace{q\phi\, \underline{\tilde{\varphi}}_2}_{\text{Null!}} \ll 2m_0 c^2 \underline{\tilde{\varphi}}_2 \quad ; \quad \underbrace{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underline{\tilde{\varphi}}_2}_{\text{Null!}} \ll 2m_0 c^2 \underline{\tilde{\varphi}}_2$$

$$\Rightarrow \underline{\tilde{\varphi}}_2 = \frac{\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{\Pi}}}{2m_0 c} \underline{\tilde{\varphi}}_1 \quad , \quad \hat{\underline{\Pi}} = \hat{\underline{p}} - \frac{q}{c} \underline{A}$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underline{\tilde{\varphi}}_1 = \frac{(\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{\Pi}})^2}{2m_0} \underline{\tilde{\varphi}}_1 + q\phi\, \hat{1}\, \underline{\tilde{\varphi}}_1}$$

$$(\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{\Pi}})^2 = \hat{\underline{\Pi}}^2 \cdot 1 + i\, \hat{\underline{\sigma}} \cdot (\hat{\underline{\Pi}} \times \hat{\underline{\Pi}})$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underline{\tilde{\varphi}}_1 = \underbrace{\left(\frac{\hat{\underline{\Pi}}^2}{2m_0} + q\phi \right) \hat{1}\, \underline{\tilde{\varphi}}_1}_{\text{sieht aus wie bei Schrödinger-Gl.}} + \underbrace{\frac{i}{2m_0} \hat{\underline{\sigma}} \cdot (\hat{\underline{\Pi}} \times \hat{\underline{\Pi}})\, \underline{\tilde{\varphi}}_1}_{\text{relativistische Korrektur}}$$

betrachte

$$\left(\hat{\underline{\Pi}} \times \hat{\underline{\Pi}}\right)_i \varphi = \left(\left(\hat{\underline{p}} - \tfrac{q}{c}\underline{A}\right) \times \left(\hat{\underline{p}} - \tfrac{q}{c}\underline{A}\right)\right)_i \varphi$$

$$= \underbrace{\left(\hat{\underline{p}} \times \hat{\underline{p}}\right)_i}_{\text{Null}} \varphi - \tfrac{q}{c}\left(\hat{\underline{p}} \times \underline{A}\right)_i \varphi - \tfrac{q}{c}\left(\underline{A} \times \hat{\underline{p}}\right)_i \varphi$$

$$+ \tfrac{q^2}{c^2} \underbrace{\left(\underline{A} \times \underline{A}\right)_i}_{\text{Null}} \varphi$$

$$= \left(-\tfrac{q}{c}\left(\underline{A} \times \hat{\underline{p}}\right)_i - \tfrac{q}{c}\left(\hat{\underline{p}} \times \underline{A}\right)_i\right) \varphi$$

Ortsdarstellung

über j,k wird summiert

$$= \left(-\tfrac{q}{c}\tfrac{\hbar}{i} \varepsilon_{ijk} A_j \partial_k - \tfrac{\hbar}{i}\tfrac{q}{c} \underbrace{\varepsilon_{ijk} \partial_j A_k}_{\varepsilon_{ikj}\partial_k A_j = -\varepsilon_{ijk}\partial_k A_j}\right) \varphi$$

$$= -\tfrac{q}{c}\tfrac{\hbar}{i} \varepsilon_{ijk} \left(A_j \partial_k - \partial_k A_j\right) \varphi$$

$\underline{A} = \underline{A}(\underline{r}, t)$

$\varphi = \varphi(\underline{r}, t)$

~~inverse~~ Produktregel:

$$\partial_k (A_j \varphi) = A_j \partial_k \varphi + (\partial_k A_j) \varphi$$

$$\left(\hat{\underline{\Pi}} \times \hat{\underline{\Pi}}\right)_i \varphi = \tfrac{q}{c}\tfrac{\hbar}{i} \varepsilon_{ijk} (\partial_k A_j) \varphi = -\tfrac{q}{c}\tfrac{\hbar}{i} \varepsilon_{ijk} \partial_j A_k$$

Benutze nun noch $\underline{B} = \nabla \times \underline{A} \Leftrightarrow B_i = \varepsilon_{ijk} \partial_j A_k$

$$\Rightarrow \left(\hat{\underline{\Pi}} \times \hat{\underline{\Pi}}\right)_i \varphi = -\tfrac{q}{c}\tfrac{\hbar}{i} B_i \varphi$$

Einsetzen in die Gleichung für $\hat{\underline{\varphi}}_1$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\underline{\varphi}}_1 = \left(\frac{(\hat{\underline{p}} - \frac{q}{c}\underline{A})^2}{2m_0} + q\phi \hat{1} \right) \hat{\underline{\varphi}}_1 - \frac{q\hbar}{2m_0 c} \hat{\underline{\sigma}} \cdot \underline{B}\, \hat{\underline{\varphi}}_1$$

mache noch Notationswechsel

$$\hat{\underline{\varphi}}_1 = \underline{\varphi} = \begin{pmatrix} \varphi_+ \\ \varphi_- \end{pmatrix}$$

„Pauli-Spinor"
Die beiden Komponenten beschreiben gerade die zwei Einstellmöglichkeiten des Spins

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underline{\varphi} = \left(\frac{1}{2m_0} (\hat{\underline{p}} - \tfrac{q}{c}\underline{A})^2 + q\phi \hat{1} \right) \underline{\varphi} - \frac{q\hbar}{2m_0 c} \hat{\underline{\sigma}} \cdot \underline{B}\, \underline{\varphi}}$$

Pauli-Gleichung (zweikomponentig!)

$\Rightarrow$ Def. des Pauli-Hamiltonians

$$\hat{H}^{\text{Pauli}} = \frac{1}{2m_0} (\hat{\underline{p}} - \tfrac{q}{c}\underline{A})^2 + q\phi \hat{1} - \frac{q\hbar}{2m_0 c} \hat{\underline{\sigma}} \cdot \underline{B}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underline{\varphi} = \hat{H}^{\text{Pauli}} \underline{\varphi}$$

Zur weiteren Interpretation des letzten Terms erinnern wir uns an die Ankopplung eines (homogenen) Magnet~~feld~~feldes in der nichtrelativist. QM

$$\underline{B} = \nabla \times \underline{A} \quad , \quad \underline{A} \overset{(*)}{=} \frac{1}{2} \underline{B} \times \underline{r} \quad \text{für homogenes Magnetfeld}$$

$$(\hat{\underline{p}} - \tfrac{q}{c}\underline{A})^2 = \hat{\underline{p}}^2 + \frac{q^2}{c^2}\underline{A}^2 - \tfrac{q}{c}\hat{\underline{p}}\cdot\underline{A} - \tfrac{q}{c}\hat{\underline{A}}\cdot\hat{\underline{p}}$$

$$\text{es gilt } (\hat{\underline{p}}\cdot\underline{A})\,\varphi = \underbrace{(\hat{\underline{p}}\cdot\underline{A})}_{\text{Null für } (*)}\varphi + \hat{\underline{A}}\cdot\hat{\underline{p}}\,\varphi$$

$$= \hat{\underline{p}}^2 + \frac{q^2}{c^2}\underline{A}^2 - 2\tfrac{q}{c}\underline{A}\cdot\hat{\underline{p}}$$

$$\frac{1}{2}(\underline{B}\times\underline{r})\cdot\hat{\underline{p}} = \frac{1}{2}(\underline{r}\times\hat{\underline{p}})\,\underline{B} = \frac{1}{2}\hat{\underline{L}}\cdot\underline{B}$$

$$= \hat{\underline{p}}^2 + \frac{q^2}{c^2}\underline{A}^2 - \tfrac{q}{c}\hat{\underline{L}}\cdot\underline{B}$$

Setze dies in die Pauli-Gl. ein und vernachlässige den Term $\hat{\underline{A}}^2$ ("diamagnetischer Term", von Größenordnung her deutlich kleiner)

$$\Rightarrow \boxed{\hat{H}^{\text{Pauli}} = \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m_0} + q\phi - \frac{q}{2m_0 c}(\hat{\underline{L}} + 2\hat{\underline{S}})\cdot\underline{B}}$$

$$\text{mit } \hat{\underline{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\underline{\sigma}}$$

Zweikomponentiges Analogon zum vierkomponentigen Dirac-Spin-Vektor

Vektor mit den Pauli-Matrizen

Man liest ab:

- bilineare Kopplung $\hat{\underline{L}}, \underline{B}$ und $\hat{\underline{S}}, \underline{B}$ (aber keine Kopplung zwischen $\hat{\underline{L}}$ und $\hat{\underline{S}}$!!!)

Im Pauli-Hamiltonian ist die

- Ankopplung an $\underline{B}$-Feld analog zur klass. Elektrodynamik

nämlich $\sim -\hat{\underline{\mu}} \cdot \underline{B}$

Operator des magnet. Moments

hier: $\hat{\underline{\mu}} = \hat{\underline{\mu}}_{Bahn} + \hat{\underline{\mu}}_{spin}$

$\hat{\underline{\mu}}_{Bahn} = \frac{q}{2m_0 c} \hat{\underline{L}}$ $\qquad$ $\hat{\underline{\mu}}_{spin} = \frac{q}{2m_0 c} 2 \hat{\underline{S}}$

speziell zum Spinanteil:

$$\hat{\underline{\mu}}_{spin} = \frac{q}{2m_0 c} \, g \, \hat{\underline{S}}$$

mit $g = 2$ Landé-Faktor

speziell Elektron:

$$q = -e_0$$

$$\hat{\underline{\mu}}_{spin} = -2 \frac{q}{2m_0 c} \hat{\underline{S}}$$

$$= -\frac{2}{\hbar} \mu_B \hat{\underline{S}}$$

mit $\mu_B = \frac{e_0 \hbar}{2m_0 c}$ Bohr'sches Magneton

Anwendung auf Wasserstoffatom

$$\hat{H}^{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + q\phi = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} - \frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$ Coulombpotential

Energie-Eigenwerte $\varepsilon_n = -\frac{13{,}6\,eV}{n^2}$

Eigenzustände $\psi_{nlm}(\underline{r})$

$\Big\}$ exakt!

im homogenen Magnetfeld $\underline{B} = B\,\underline{e}_z$ — Einheitsvektor in z-Richtung

$\Rightarrow$ Kopplungsterm in $\hat{H}^{Pauli}$ der Form
$$(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)B$$

beachte
$$[\hat{H}^{H}, \hat{L}_z] = 0, \quad [\hat{H}^{H}, \hat{S}_z] = 0$$

$\Rightarrow$ ~~Eig~~ Eigenzustände können sofort angegeben werden!

$$\varphi = \underbrace{\psi_{nlm}(\underline{r})}_{\text{normale H-Atom-Wellenfunktion}}\,\underline{\chi}_{m_s}$$

Spinfunktion $m_s = \pm\frac{1}{2}$

$$\underline{\chi}_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$
$$\underline{\chi}_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

Zugehörige Energieeigenwerte

$$\hat{H}^{Pauli}\varphi = \underbrace{\hat{H}^{H}|\varphi\rangle}_{\varepsilon_n|\varphi\rangle} + \frac{Be_0}{2m_0c}\left(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z\right)\varphi$$

es gilt: $\hat{L}_z\varphi = \hbar m\varphi$; $\hat{S}_z\varphi = \hbar m_s\varphi$

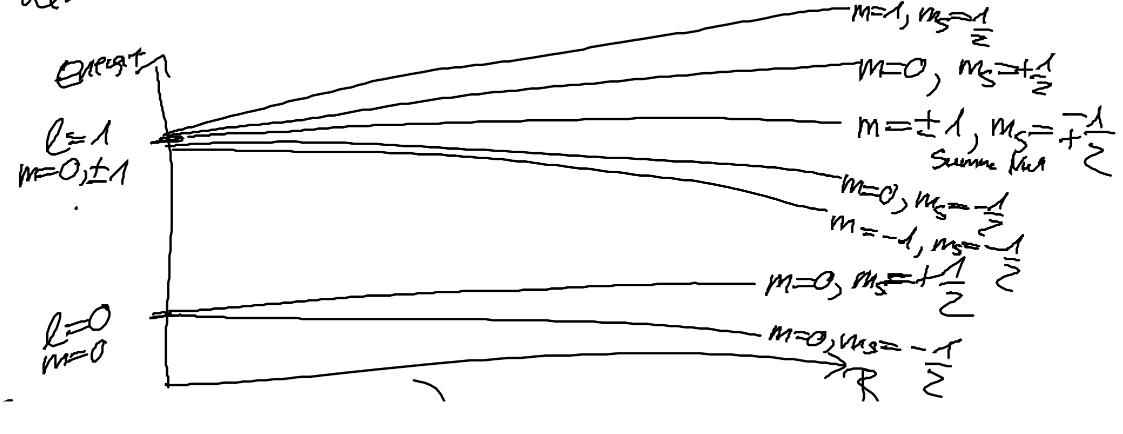
$$\Rightarrow \hat{H}^{Pauli}\varphi = \underbrace{\left(\varepsilon_n + \frac{Be_0}{2m_0c}\left(\hbar m + 2\hbar m_s\right)\right)}_{\text{Gesamter Energieeigenwert von } \hat{H}^{Pauli}:\ \varepsilon_{n,m,m_s}}\varphi$$

ε_n: Energieeigenwerte des H-Atoms ohne Spin

$\hbar m$: Eigenwerte der z-Komponente von $\underline{L}$

$\hbar m_s$: Eigenwerte Spin

Einbeziehung des Spins führt zu einer zusätzl. Aufspaltung der Linien



(I.3. Nicht-relativist. Grenzfall
a) Einfachste Näherung, Pauli-Gl.)

b) Höhere relativistische Korrekturen, Spin-Bahn-Wechselwirkung

Die relativist. Korrektur niedrigster Ordnung führt auf Pauli-Hamiltonian. Dort koppeln $\hat{\underline{L}}$ und $\hat{\underline{S}}$ unabhängig voneinander an das äußere Feld $\underline{B}$!

Wir wissen: $\hat{\underline{L}}$ und $\hat{\underline{S}}$ beeinflussen sich gegenseitig...
aber
$\Rightarrow$ man benötigt offensichtlich noch höhere Korrekturen!

Einschub: Semi-klass. Abschätzung der Spin-Bahn-Wechselwirkung

- Betrachte Elektron im elektr. Feld des positiv geladenen Kerns
- Feld im Ruhesystem des Kerns: $\underline{E}(\underline{r}) = -\nabla \underbrace{\phi(\underline{r})}_{\text{statisch}}$, $\underline{B} = 0$

- Elektron bewegt sich relativ zum Kern
$\Rightarrow$ spürt die Felder $\underline{E}'$, $\underline{B}'$

Zusammenhänge (aus der speziellen Relativitätstheorie)

Siehe z.B. Nolting

$$\left\{\begin{aligned} \underline{B}' &= \gamma\left[\underline{B} - \frac{1}{c}(\underline{\beta}\times\underline{E})\right] - \frac{\gamma^2}{\gamma+1}\underline{\beta}(\underline{\beta}\cdot\underline{B}) \\ \underline{E}' &= \gamma(\underline{E} + c(\underline{\beta}\times\underline{B})] - \frac{\gamma^2}{\gamma+1}(\underline{\beta}(\underline{\beta}\cdot\underline{E})) \end{aligned}\right.$$

$\underline{\beta} = \frac{\underline{v}}{c}$, $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$

hier $\underline{B} = 0$, $\gamma \approx 1$ (nicht-relativist. Grenzfall!)

$$\Rightarrow \underline{B}' \approx -\frac{1}{c^2}(\underline{v}\times\underline{E}) = \frac{1}{c^2}(\underline{E}\times\underline{v})$$

benutze: $\underline{E} = -\nabla\phi(r)$ Zentralpotential

$$= -\phi'(r)\,\underline{r}/r \quad \text{mit } \phi' = \frac{\partial\phi}{\partial r}$$

$$\Rightarrow \underline{B}' = -\frac{1}{r}\phi'(r)\frac{1}{c^2}(\underline{r}\times\underline{v})$$

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

Bahn-drehimpuls

Das Magnetfeld, welches auf das Elektron wirkt, ist linear im Bahndrehimpuls

Benutze noch: laut Pauli-Gl. koppelt der Spin $\hat{\underline{S}}$ linear an externes Feld an

$\Rightarrow$ Erhalte Zusatzterm im Hamiltonian:

setze $\underline{B}^{ext} = \underline{B}'$

$$-\frac{q}{2m_0 c}\,2\hat{\underline{S}}\cdot\underline{B}^{ext} \underset{q=-e_0}{=} \frac{e_0}{2m_0 c}(2\hat{\underline{S}}\cdot\underline{B}^{ext}) =$$

$\Rightarrow$ Abschätzung der Spin-Bahn-Wechselwirkung!!

$$= -\frac{1}{r m_0^2}\phi'(r)\,\hat{\underline{S}}\cdot\underline{L}$$

(Vorsicht: Die angegebene Formeln für den Zusammenhang $\underline{B}' \Leftrightarrow \underline{B}$, $\underline{E}' \Leftrightarrow \underline{E}$ gelten eigentlich nur für zwei Inertialsysteme... Ruhesystem des Elektron ist kein Inertialsystem ... trotzdem wird die wesentl. Physik erfaßt!)

Ende Exkurs

Strenge Herleitung der Spin-Bahn-WW basierend auf leichten Korrektur der Dirac-Gl.

betrachte Dirac-Theorie für den Fall $\underline{A}=0$ ($\Leftrightarrow \underline{B}=0$)
aber $\phi \neq 0$, ϕ Zentralpotential

$$\hat{H}_D = c\,\hat{\underline{\alpha}}\cdot\hat{\underline{p}} + \hat{\beta} m_0 c^2 + q\phi$$

setze wieder $\underline{\psi} = \begin{pmatrix} \underline{\varphi}_1 \\ \underline{\varphi}_2 \end{pmatrix} = e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} \begin{pmatrix} \tilde{\underline{\varphi}}_1 \\ \tilde{\underline{\varphi}}_2 \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \tilde{\underline{\varphi}}_1 \\ \tilde{\underline{\varphi}}_2 \end{pmatrix} = c\begin{pmatrix} (\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\,\tilde{\underline{\varphi}}_2 \\ (\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\,\tilde{\underline{\varphi}}_1 \end{pmatrix} + q\phi\begin{pmatrix} \tilde{\underline{\varphi}}_1 \\ \tilde{\underline{\varphi}}_2 \end{pmatrix} - 2m_0c^2\begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{\underline{\varphi}}_2 \end{pmatrix}} \quad (*)$$

noch exakt!

Vorgehen jetzt: $\tilde{\underline{\varphi}}_i = \underline{\varphi}_i(\underline{r})\, e^{-iEt/\hbar}$

Ansatz, um stationäre Lösungen zu finden

Einsetzen in (*):

$$\Rightarrow 1)\quad E\,\underline{\varphi}_1(\underline{r}) = c\,\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}\,\underline{\varphi}_2(\underline{r}) + q\phi\,\underline{\varphi}_1(\underline{r})$$

$$2)\quad E\,\underline{\varphi}_2(\underline{r}) = c\,\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}}\,\underline{\varphi}_1(\underline{r}) + q\phi\,\underline{\varphi}_2(\underline{r}) - 2m_0c^2\,\underline{\varphi}_2(\underline{r})$$

löse 2) nach $\underline{\varphi}_2$ auf und setze in 1)

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

$$+ q\,\phi\,\underline{\varphi}_1(\underline{r})$$

bis hierhin nichts genähert!