

Wsk. aus der Dirac-Theorie für 4-er Spinor  $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = e^{-i \frac{m_0 c^2}{\hbar} t} \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_1 \\ \tilde{\psi}_2 \\ \tilde{\psi}_3 \\ \tilde{\psi}_4 \end{pmatrix} \quad \text{einsetzen (in die Dirac-Gl. mit elektromagnet. Feld)}$$

Holeitung Pauli-Gleichung:  $q\phi \ll 2m_0 c^2$ ,  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi} \ll 2m_0 c^2 \tilde{\psi}$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi} = \underbrace{\left( \frac{\hat{p} - \frac{q}{c} \underline{A}}{2m_0} \right)^2}_{\text{kinet. Energie}} + q\phi \tilde{\psi} - \underbrace{\frac{q}{c} \frac{\hbar}{2m_0} \underline{\hat{\sigma}} \cdot \underline{B}}_{\text{relativist. Korrektur}} \tilde{\psi}$$

"grobe Komponente" des Viererspinors sicht aus wie in der nicht-relativ. SG! Zweikomponentige Gl.!

Notation:  $\tilde{\psi} \rightarrow \psi = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}$  "Pauli-Spinor"

führe noch ein:  $\underline{\hat{S}} = \frac{\hbar}{2} \underline{\hat{\sigma}}$ ,  $\underline{\hat{L}} = (\underline{R} \times \underline{p})$ , vernachlässige Term  $\sim \underline{A}^2$  (diamagnet. Fern)

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H}^{\text{Pauli}} \psi$$

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

Bemerkungen

- Ankopplung der Drehimpulse an das  $\underline{B}$ -Feld sieht aus wie in der klass. Elektrodynamik

$$\text{Kopplungsterm: } -\underline{\hat{\mu}} \cdot \underline{B} \quad \text{Operator des magnet. Moments}$$

$$\text{mit } \underline{\hat{\mu}} = \underline{\hat{\mu}}_{\text{Bahn}} + \underline{\hat{\mu}}_{\text{Spin}} = \frac{q}{2m_0 c} (\underbrace{\underline{\hat{L}}}_{\text{Bahn-drehimpuls}} + 2\underbrace{\underline{\hat{S}}}_{\text{Spin}})$$

Spezialfall zum Spin-Ansatz

$$\vec{\mu}_{\text{Spin}} = 2 \cdot \frac{q}{2m_0 c} \vec{S} \stackrel{!}{=} g \cdot \frac{q}{2m_0 c} \vec{S}$$

Elektron  $q = -e_0$  <sup>Elementarladung</sup>

$$\Rightarrow \vec{\mu}_{\text{Spin}} = -2 \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S} \quad \text{mit } \mu_B = \frac{e_0 \hbar}{2m_0 c} \quad \text{Bohr'sches Magneton}$$

Anzahl der Bahndrehimpulse: Wie in der Schrodinger-Theorie (Zeeman-Effekt I)  
 Ergebnis aus der Pauli-Theorie!  
 "Lande-Faktor"

Anwendung auf Wasserstoffatom (H-Atom)

nicht-relativist:  $\hat{H}^{\text{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + q \phi(\underline{r})$  mit  $q \phi(\underline{r}) = -\frac{e_0^2}{4\pi \epsilon_0 r}$  <sup>Coulombpotential</sup>

entspricht gerade den ersten beiden Termen in  $\hat{H}^{\text{Pauli}}$

$$\hat{H}^{\text{Pauli}} = \hat{H}^{\text{H}} - \frac{q}{2m_0 c} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \underline{B} \quad q = -e_0$$

Sei  $\underline{B} = B \underline{e}_z$

$$\Rightarrow [\hat{H}^{\text{H}}, \vec{L}] = 0, [\hat{H}^{\text{H}}, \vec{S}] = 0$$

Rotationsinvarianz <sup>nicht-relativist. Hamiltonianer</sup>  
 "coefs nichts" vom Spin

Eigenzustände von  $\hat{H}^{\text{Pauli}}$  können sofort angegeben werden!

$$\psi = \underbrace{\psi_{nlm}(\underline{r})}_{\text{Pauli-Spinor (z-Komponente)}} \cdot \underbrace{\chi_{m_s}}_{\text{Spinfunktionen (Eigenfunktionen von } \hat{S}_z)} \quad \chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

"Normalen" H-Atom Wellenfunktion (charakterisiert durch die Quantenzahlen  $n, l, m$ )  
 $m = -l, \dots, l$

Ergebnis:  
 $S = \frac{1}{2}$   
 $\Rightarrow m_s = \pm \frac{1}{2}$

$$\psi_{nlm}(\underline{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

Stationäres Feld im äußeren Feld  $\underline{B} = B \underline{e}_z$

$$\hat{H}^{\text{Pauli}} \varphi = \left( \epsilon_n + \frac{\beta_0}{2m_0 c} (\hat{L}_m + 2\hat{L}_{ms}) \right) \varphi$$

gesamte Energieerwartung

dabei haben wir benutzt =

$$\hat{H}^{\text{H}} \varphi = \epsilon_n \varphi$$

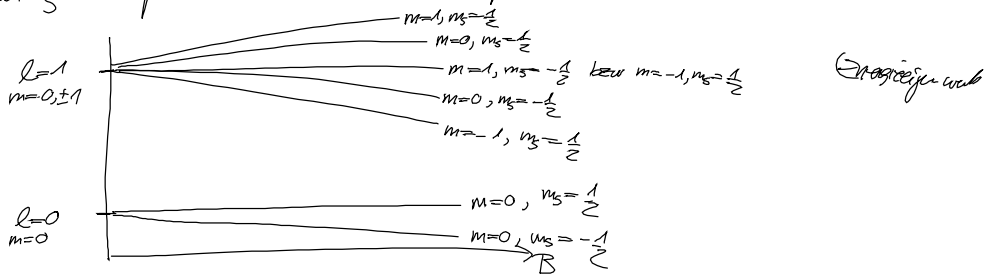
$$\hat{L}_z \varphi = \hbar m \varphi$$

$$\hat{S}_z \varphi = \hbar m_s \varphi$$

$$\left( \epsilon_n \sim -\frac{1}{n^2} \right)$$

im Vergleich zum nicht-relativist. Fall:

Entzerrung des Spins zu einer Zerstreuung. Aufspaltung der Curves!



## b) Höhere relativistische Korrekturen, Spin-Bahn-Wechselwirkung

bisher hatten wir gesehen:

Die relativistische Korrektur (aus der Dirac-Gl.) in niedrigster Ordnung führt auf die Pauli-Gleichung:

Dort koppeln  $\hat{L}$  und  $\hat{S}$  unabhängig voneinander an das äußere Feld  $\underline{B}$

Wir wissen aber:

$\hat{L}$  und  $\hat{S}$  beeinflussen sich gegenseitig!

→ Notwendig für Berechnung höherer Korrekturen

Einschub: Klassische Abschätzung der Spin-Bahn-Wechselwirkung

- Betrachte ein Elektron im Feld des (positiv geladenen) Kerns
- Atomkern erzeugt elektr. Potential  $\phi(r)$ , aber kein Magnetfeld (ruhend!)

$\Rightarrow$  Resultierende Felder im Ruhesystem des Kerns:

$$\underline{E} = -\nabla\phi(r), \quad \underline{B} = 0$$

Berechne nun die entsprechenden Felder  $\underline{E}'$ ,  $\underline{B}'$  im Ruhesystem des sich bewegenden Elektrons (spezielle Relativitätstheorie)

$$\underline{B}' = \gamma \left[ \underline{B} - \frac{1}{c} (\underline{v} \times \underline{E}) \right] - \frac{\gamma^3}{\gamma+1} \underline{v} \cdot (\underline{v} \cdot \underline{B})$$

$$\underline{E}' = \gamma \left[ \underline{E} + c (\underline{v} \times \underline{B}) \right] - \frac{\gamma^3}{\gamma+1} \underline{v} (\underline{v} \cdot \underline{E})$$

betrachte zwei relativ zueinander bewegte Inertialsysteme

mit  $\beta = \frac{v}{c}$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

hier: nicht-relativistischer Grenzfall:  $\gamma \approx 1$

$$\underline{B} = 0$$

Folgt auf  $\underline{B}'$ :  $\underline{B}' = -\frac{1}{c^2} (\underline{v} \times \underline{E}) = \frac{1}{c^2} (\underline{E} \times \underline{v})$

benutze jetzt:  $\underline{E} = -\nabla\phi(r)$ ,  $\phi(r)$ : Zentralspotential

$$\underline{E} = -\phi' \frac{\underline{r}}{r} = -\frac{1}{r} \phi'(r) \underline{r}$$

$\left( \frac{d\phi(r)}{dr} \right)$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \underline{B}' &= -\frac{1}{r} \phi'(r) \frac{1}{c^2} (\underline{r} \times \underline{v}) = -\frac{1}{r} \phi'(r) \frac{1}{c^2 v_0} (\underline{r} \times \underline{r}) \\ &= -\frac{1}{r} \phi'(r) \frac{1}{c^2 v_0} \underline{L} \quad \text{Bahndrehimpuls} \end{aligned}$$

Ergebnis: Das "externe Feld" im Ruhesystem des Elektrons ist linear im Bahndrehimpuls!

Benutze noch folgende Idee: Drehimpuls (und insbesondere auch der Spin) koppeln linear an ein externes Feld!

$\Rightarrow$  Zusatzterm im Hamiltonian  $q = -e$ , quantisierte Drehimpulse  

$$\frac{-q}{2m_0 c} (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}) \cdot \mathbf{B} \sim \underbrace{-\frac{1}{\gamma} \phi'(r) \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}}_{\text{Spin-Bahn-Kopplung}}$$

Beachte: Wir haben bereits im klassischen Teil der Argumentation einen Fehler gemacht: Da das Elektron um den Kern kreist ist es eigentlich kein Inertialsystem mehr ...

Trotzdem trifft das Argument bereits die wesentl. Physik!

Ende Einstud

Strenge Herleitung der Spin-Bahn-Wechselwirkung (und weiterer Terme) aus der Dirac-Theorie

Startpunkt: Dirac-Gleichung, speziellere auf den Fall  $\phi(r) \neq 0$  aber  $A = 0$   
Skalarpotential  
hier: Zentralpotential

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

Setze wieder  $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = e^{-i/\hbar m_0 c^2 t} \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_1 \\ \tilde{\psi}_2 \end{pmatrix}$

Einsetzen in die Dirac-Gl:  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H}_D \psi$  (dividiere durch den Zeitfaktor, da die Phasenfunktion auf  $e^{-i/\hbar m_0 c^2 t}$

$$\textcircled{*} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_1 \\ \tilde{\psi}_2 \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \hat{\sigma} \cdot \hat{p} & \tilde{p}_z \\ \hat{\sigma} \cdot \hat{p} & \tilde{p}_z \end{pmatrix} + q \phi \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_1 \\ \tilde{\psi}_2 \end{pmatrix} - 2m_0 c^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{\psi}_2 \end{pmatrix}$$

noch ergibt!

Erinnerung: Bei der Herleitung der Pauli-Gl. hatten wir gesehen:  $q \phi \tilde{\psi}_2 = 0$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \vec{\psi} = 0$$

(da ~~es~~ viel ~~Wahre~~ als die ~~Relativität~~!)

Jetzt: Ordnen Ritor (noch zu zeigen...)

Ansatz, um das stationäre Problem zu betrachten

$$\vec{\psi}_i(r, t) = \underline{\psi}_i(r) e^{-iEt/\hbar}$$

$i = 1, 2$

beach.  $E$  ist die Energie nach Abzug der Ruheenergie!!

(das ist nicht einfach  $\sqrt{c^2 p^2 - m_0^2 c^4} - m_0 c^2$  wie im freien Fall, weil wir hier Teilchen im Potential betrachten!)

Setze Ansatz in (\*) ein und dividiere durch  $e^{-iEt/\hbar}$

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

$$2) E \underline{\psi}_2(r) = c(\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) \underline{\psi}_1(r) + q\phi \underline{\psi}_2(r) - 2m_0 c^2 \underline{\psi}_2(r)$$

$$\Leftrightarrow \underbrace{(E - q\phi + 2m_0 c^2)}_{\text{Skalar!}} \underline{\psi}_2(r) = c(\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) \underline{\psi}_1(r)$$

auflöse nach  $\underline{\psi}_2(r)$  und ersetze in 1)

$$E \underline{\psi}_1(r) = c(\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) \frac{1}{E - q\phi(r) + 2m_0 c^2} c(\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) \underline{\psi}_1(r) + q\phi \underline{\psi}_1(r)$$

$$\Leftrightarrow E \underline{\psi}_1(r) = \frac{c(\hat{\sigma} \cdot \hat{p})}{2m_0 c^2} \frac{1}{\left(1 + \frac{E - q\phi(r)}{2m_0 c^2}\right)} c(\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) \underline{\psi}_1(r) + q\phi \underline{\psi}_1(r)$$

Benutze: Im nicht-relativist. Grenzfall ist die Größe  $\frac{E - q\phi}{2m_0 c^2} \ll 1$

benutze jetzt Taylorentwicklung:

$$(1+x)^m = 1 + mx + \frac{m(m-1)}{2!} x^2 + \dots$$

hier:  $x = \frac{E - q\phi}{2m_0 c^2}$ ,  $m = 1$

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

(Beachte: Bei der Herleitung der Pauli-Gl. hatten wir gesetzt  $E \ll m_0 c^2$ ,  $q\phi \ll m_0 c^2$   
 $\nearrow$   
 Zeit well gesetzt!  
 $\Rightarrow x = 0$  ("0. Ordnung")

Jetzt gehen wir bis zu erster Ordnung in  $x$ !

aus 1)

$$E \psi_{\uparrow}(r) \approx \frac{1}{2m_0} (\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) \left( 1 - \frac{E - q\phi(r)}{2m_0 c^2} \right) (\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) \psi_{\uparrow}(r) + q\phi \psi_{\uparrow}(r)$$