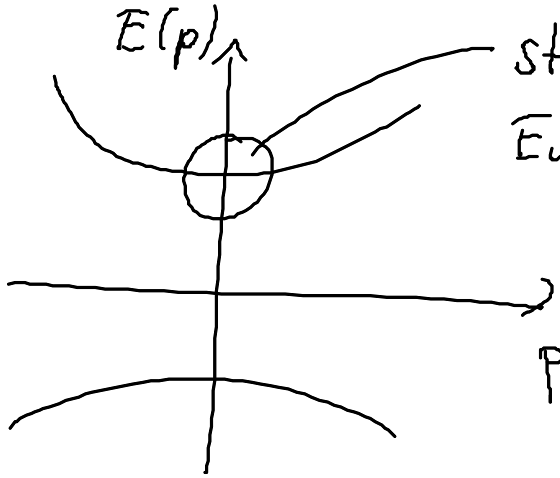
Zweikomponenten-Diracgleichung mit abgetrennter Ruheenergie

$$i\hbar\,\partial_t\,\vec{\varphi}_1 = c\,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\Pi}\,\vec{\varphi}_2 + q\phi\,\vec{\varphi}_1$$

$$i\hbar\,\partial_t\,\vec{\varphi}_2 = c\,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\Pi}\,\vec{\varphi}_1 + q\phi\,\vec{\varphi}_2 - 2mc^2\,\vec{\varphi}_2$$



störungstheoretische Entwicklung

↓

Spineffekte

3.2. Der einfachste Fall: Pauligleichung

Idee: energetische Skala klein gegen die Ruheenergie mc^2

$$\dot{\vec{\varphi}} \ll \frac{mc^2}{\hbar}\vec{\varphi}\,, \quad q\phi \ll mc^2$$

$$\vec{\varphi}_2 = \frac{\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\Pi}}{2mc}\,\vec{\varphi}_1\,,$$ in Gleichg. für $\vec{\varphi}_1$ eingeben

→ geschlossene Gleichung für $\vec{\varphi}_1$

$$i\hbar\,\partial_t \vec{\varphi}_1 = \underbrace{\frac{(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\Pi})^2}{2m}}_{\text{modifizierte kinetische Energie}} \vec{\varphi}_1 + q\phi\vec{\varphi}_1$$

Schrödingergleichung : $(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\Pi})^2 \to \vec{p}^{\,2}$

$$(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{a})(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{b}) = \hat{1}\,\vec{a}\cdot\vec{b} + i\,\hat{\vec{\sigma}}\,(\vec{a}\times\vec{b})$$

ist bewiesen im Tutorium

$$\vec{\Pi} = \vec{p} - q\vec{A} = \vec{a} = \vec{b}$$

in Formel

$$i\hbar\,\partial_t \vec{\varphi}_1 = \frac{\hat{1}}{2m}\,\vec{\Pi}^2\vec{\varphi}_1 + i\,\underline{\underline{(\vec{\Pi}\times\vec{\Pi})}}\cdot\hat{\vec{\sigma}}\,\vec{\varphi}_1 + q\phi\vec{\varphi}_1$$

$$(\vec{\Pi}\times\vec{\Pi})^i_0 = \left[(\vec{p} - q\vec{A})\times(\vec{p} - q\vec{A})\right]^i_0$$

i-te Komponente suche $(\quad)^i$

$$= \Big[\underbrace{\vec{p}\times\vec{p}}_{①} \underbrace{- q\,\vec{A}\times\vec{p} - q\,\vec{p}\times\vec{A}} + \underbrace{q^2\vec{A}\times\vec{A}}_{②}\Big]^i$$

$$\vec{p}\times\vec{p}\,,\quad \vec{A}\times\vec{A} \Rightarrow 0$$

Kreuzprodukt

$$= -q\frac{\hbar}{i}\left(\varepsilon^{ijk}A_j\partial_k + \varepsilon^{ikj}\partial_k A_j\right)\circ$$

$$= -q\frac{\hbar}{i}\varepsilon^{ijk}\left(A_j\partial_k - \partial_k A_j\right)\circ$$

Vertauschg. $j \leftrightarrow k$ im ε Tensor

$$= -q\frac{\hbar}{i}\varepsilon^{ijk}\left(-\partial_k A_j\right)\circ$$

nach Produktregel

$$= -q\frac{\hbar}{i}\varepsilon^{ikj}\partial_k A_j = \left[-q\frac{\hbar}{i}\vec{D}\times\vec{A}\right]^i = \underline{\underline{-q\frac{\hbar}{i}B_i}}$$

B_i ist die i-te Komponente eines

z.B. von außen angelegten Magnetfelds

$$i\hbar\,\partial_t \vec{\varphi}_1 = \left(\frac{(\underline{p} - q\vec{A})^2}{2m}\,\hat{1} + q\phi\,\hat{1} \right) \vec{\varphi}_1 \;//$$

$$\underbrace{- \frac{q\hbar}{2m}\,\vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{B}\ \vec{\varphi}_1}$$

neu! beschreibt die Ankopplung des Spins $\left(\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}\right)$ an ein Magnetfeld

(Stern Gerlach - Versuch!)

- oberer Teil ist identisch mit Schrödinger-gleichung eines Elektrons in äußerem Feld $(\phi, \vec{A})$

Unschön an der Gleichung ist noch, daß eine Kopplung an die Potentiale, nicht an Felder erfolgt.

3.3. Eichtransformation der elektromagnetischen Potentiale, neue Lagrange funktion

$L \rightarrow H$, um $\underline{H}$ zu finden

$\underline{H}$ ungleich „schön", möchte Felder darin stehen haben

$$L' = L + \frac{d}{dt}\chi(t)$$

diese Umeichung mit $\chi(t) = -q\vec{r}\cdot\vec{A}(0,t)$

Kein Feldänderung

$$+\frac{q}{2}\vec{r}\cdot\left(\vec{r}\cdot\vec{\nabla}A(0,t)\right)$$

Ort „0" bedeutet

A an Stelle des Kerns

atomares System

Diese Transformation führt zu Pauli-Hamiltonian

der nur noch die Felder enthält.

$$\underline{H}_{Pauli}\,\vec{\varphi}_1 = i\hbar\,\partial_t\,\vec{\varphi}_1$$

$$\underline{H}_{Pauli} = \left(\frac{p^2}{2m} - q\vec{r}\cdot\vec{E} - \left(\frac{q}{2m}\vec{r}\times\vec{p}\right)\cdot\vec{B}\right)\hat{1} + q\phi$$

① ② ③

$$- \frac{q}{m} \vec{\hat{S}} \cdot \vec{B} + \frac{q}{2m} \left(\frac{q}{4} \vec{r} \times \left(\vec{r} \times \vec{B} \right) \right) \cdot \vec{B} \, \hat{1}$$

④ ⑤

a) extern Potentiale $\vec{A}, \phi \xrightarrow[L \to L']{} \vec{E}, \vec{B}$ (extern)

b) $q\phi$ ist das Kernpotential

c) ① kinetische Energie ② $-\vec{d} \cdot \vec{E}$ Dipolenergie

③ $\vec{r} \times \vec{p} = \underline{\underline{\vec{e}}}$ ist der Drehimpulsoperator

magnetische Dipolenergie $-\vec{m} \cdot \vec{B}$

die mit dem <u>Bahn</u>drehimpuls verbunden ist

④ Kopplung des Spins an ein extern Magnetfeld

(Stern - Gerlach - Versuch)

⑤ Diamagnetismus, erzeugt indem das Magnetfeld ein magnetisches Moment erzeugt das intrinsisch nicht vorhanden ist

Ladung $-q = e > 0$ ist die Elementarladung

für $q < 0$ (Elektron)

3.4. Naives (z.T. falsches) Beispiel:

Wasserstoffatom im magnetischen Feld

wenn weiteren relativistischen Korrekturen klein gegen die Spin-Magnetfeld bzw. Bahndrehimpulsimpuls-Magnetfeldkopplung ist

$$\underline{H} = \left(\frac{1}{2m}\vec{p}^{\,2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right) + \frac{e}{2m}\left(\underline{l}_z + g\,\hat{s}_z\right)B_0$$

kinetische E. Kernpotential des Protons

$\vec{B} = B_0\vec{e}_z$

$g = 2$

gyromagnetische Zahl

$g = 2$ in bisheriger Beschreibung,
bessere Theorien (Quantenelektrodynamik)
liefern Werte die > 2 → Test f. Theorie weil
g im Experiment bestimmt werden kann

$\underline{H}\,\vec{\varphi}_1 = \varepsilon\,\vec{\varphi}_1$ stationäre Pauligleichung lösen

$$\vec{\varphi}_1 = \varphi_{nlm}(\vec{r})\,\vec{\chi}_{m_s}\,, \quad \vec{\chi}_{m_s} = \begin{cases} \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} & m_s = \frac{1}{2} \\ \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} & m_s = -\frac{1}{2} \end{cases}$$

löse diese Gleichung

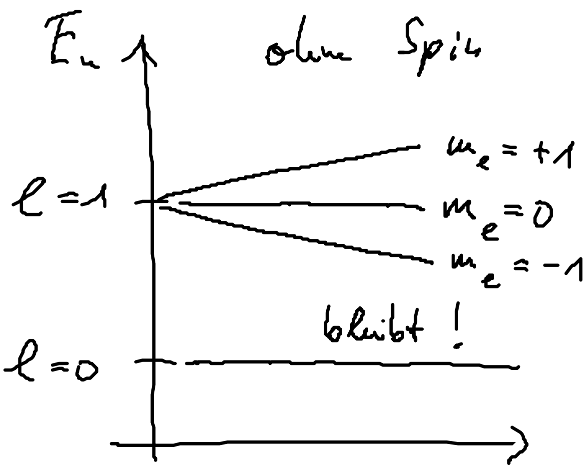
$$\underline{H}\,\varphi_{nlm}\vec{\chi}_{m_s} = \left(\varepsilon_n + \frac{B_0 e}{2m}(\hbar m_l + \hbar m_s g)\right)\varphi_{nlm}\vec{\chi}_{m_s}$$

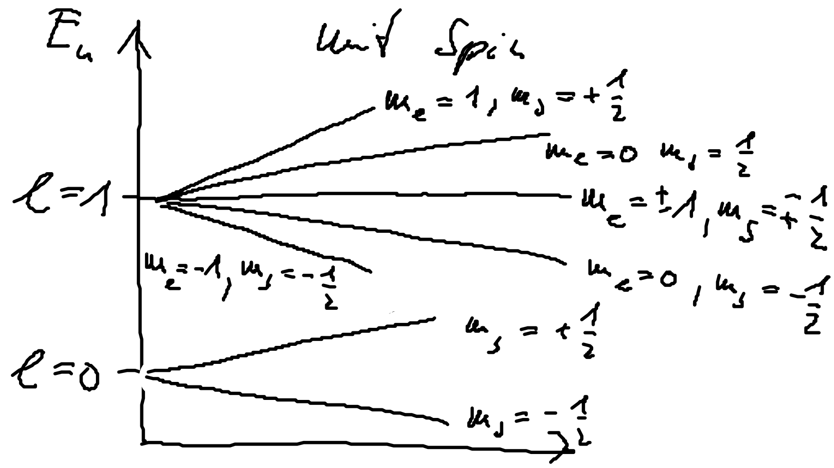
$$\varepsilon_n = -\frac{Ry}{n^2}$$

Eigenfunktion des H-Atom Hamiltonians

neue Energien des H-Atoms im Magnetfeld

$$E_n(m_l, m_s) = \varepsilon_n + \frac{B_0 e}{2m}\hbar(m_l + m_s g)$$





B_0

Entartung der $l=1$ Zustände wird aufgehoben

$(n = \text{fest})$

B_0

reichhaltiges E-Spektrum durch Spin, insbesondere Aufspaltung der $l=0$ artigen Zustände

optisch Spektren dazu später

3.5. Höhere relativistische Korrekturen: Spin-Bahn Kopplung und all das ...

starte erneut von Diracgleichung f. $\vec{\varphi}_1, \vec{\varphi}_2$

$$i\hbar \partial_t \vec{\varphi}_1 = c \vec{\sigma} \cdot \vec{p}\, \vec{\varphi}_2 + q \phi \vec{\varphi}_1$$

$$i\hbar \partial_t \vec{\varphi}_2 = c \vec{\sigma} \cdot \vec{p}\, \vec{\varphi}_1 - (2mc^2 - q\phi)\vec{\varphi}_2$$

externe Felder abschalten $E, B, \phi_{ext}, A_{ext} \to 0$

ϕ: Kernpotential, z.B. H-Atom

stationäre Lsg.: $\varphi_i \to \varphi_i \, e^{-iEt/\hbar}$

führt zu stationärer Diracgleichung

$$E\vec{\varphi}_1 = c\,\vec{\hat\sigma}\cdot\vec{p}\,\vec{\varphi}_2 + q\phi\,\vec{\varphi}_1$$

$$\vec{\varphi}_2 = \left(E + 2mc^2 - q\phi\right)^{-1} c\,\vec{\hat\sigma}\cdot\vec{p}\,\vec{\varphi}_1$$

Also: $\vec{\varphi}_2$ in Gl. für $\vec{\varphi}_1$ einsetzen

$$E\vec{\varphi}_1 = \frac{c\,\vec{\hat\sigma}\cdot\vec{p}}{2mc^2}\underbrace{\Bigg(1 + \underbrace{\frac{E - q\phi}{2mc^2}}_{\text{klein}}\Bigg)^{-1}}_{\underbrace{1 - \frac{E - q\phi}{2mc^2}}} c\,\vec{\hat\sigma}\cdot\vec{p}\,\vec{\varphi}_1 + q\phi\,\vec{\varphi}_1$$

(1. Ordng. Taylor-reihe)

$$\equiv \frac{1}{2m}\underbrace{\vec{\hat\sigma}\cdot\vec{p}\; f(r)\;\vec{\hat\sigma}\cdot\vec{p}}_{Z}\;\vec{\varphi}_1 + q\phi\,\vec{\varphi}_1$$

Z:

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

(i) $\left(\vec{\hat\sigma}\cdot\vec{p}\right)^2 =$ Formel $(\vec{\hat\sigma}\cdot\vec{a})(\vec{\hat\sigma}\cdot\vec{b}) = \hat{1}\,\vec{p}^{\,2}$

(ii) $\left[\vec{\hat\sigma}\cdot\vec{p}, f(r)\right] = \left(\vec{\hat\sigma}\cdot\vec{p}\, f(r) - f(r)\,\vec{\hat\sigma}\cdot\vec{p}\right).$

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

$$= \frac{\hbar}{i}\,\vec{\hat\sigma}\cdot\vec\nabla f(r) = \frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial f(r)}{\partial r}\,\frac{\overbrace{\vec{\hat\sigma}\cdot\vec r}^{\vec{\hat\sigma}\cdot\vec e_r}}{r}$$

kugelsymmetrisch in $\vec e_r$-Richtg.

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

$$(\vec{\hat\sigma}\cdot\vec r)(\vec{\hat\sigma}\cdot\vec p) = \vec r\cdot\vec p + i\,\vec{\hat\sigma}\,(\vec r\times\vec p)$$

$$= \vec r\cdot\vec p + \underline{\underline{i\,\vec{\hat\sigma}\cdot\vec\ell}}$$

Kopplg von Spin und Drehimpuls

Zurück in die Gleichg. für φ_1:

$$E\,\vec\varphi_1 = \left(\underline{\underline{\frac{\vec p^{\,2}}{2m}}} + q\,\phi\right)\vec\varphi_1 \quad \Big\{ \text{ Elektron im Kernpotential}$$

$$-\frac{p^4}{8m^3c^2}\,\vec{\varphi}_1$$ Korrektur durch relativistisch $E = E(p)$, Wurzel entwickelt

$$\frac{E-q\phi}{2mc^2} \simeq \frac{p^2}{4m^2c^2}$$ (erste Näherung)

$$-\frac{\hbar^2 q\,\phi'}{4m^2c^2}\,\partial_r\,\vec{\varphi}_1$$ Darwinterm / Kontaktterm

$$+\frac{q\,\phi'}{2m^2c^2 r}\,\vec{\hat{s}}\cdot\vec{\ell}\;\vec{\varphi}_1$$ Spin-Bahn-Drehimpuls-kopplung

$$\text{Darwin} \hat{=} \frac{\hbar^2 q\,\rho_{kern}}{8m^2c^2\varepsilon_0}$$ als Umschreibung mögl.

ist wichtig wenn Elektron „Kontakt" mit der Ladungsdichte ρ_{kern} hat (Herleitung liefere ich nach