3.4. Beispiel f. Pauligleichung: Wasserstoff im starken Magnetfeld

wenn weitere relativistische Korrekturen wie Spin-Bahn Kopplung und Darwinterm (siehe diese VL) klein gegen den

Term $-\frac{q}{2m_0}\left(\ell_z \hat{1} + g\,\hat{s}_z\right) B_z$ (Spin-Magnetfeld-Kopplung)

sind, so reicht die bisherige Pauligleichg. aus

unser Beispiel gilt für Magnetfeld in z-Richtg. $q = -e$, $e > 0$

$$\underline{H} = \underbrace{\left(\frac{1}{2m_0}\vec{p}^{\,2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)}_{\underline{H}_{Atom}\ \text{(Schrödinger)}} + \underbrace{\frac{e}{2m_0}\left(\ell_z \hat{1} + g\,\hat{s}_z\right) B_z}_{\text{Korrektur durch die Pauligleichung}}$$

wie verändert diese Korrektur (H-Atom im Magnetfeld) die Eigenfunktion und Eigenenergie ?

<u>Schrödingergl</u> : $\underline{H}_{Atom} \psi_{nlm_e} = \varepsilon_n \psi_{nlm_e}$ n, l, m Quantenzahl

<u>Pauligl</u> : $\underline{H} \vec{\varphi}_1 = \varepsilon \vec{\varphi}_1$

$$\underbrace{\vec{\varphi}_1 = \psi_{nlm_e}(\vec{r}) \vec{\chi}_{m_s}}_{\text{Produktansatz}} , \quad \chi_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\underline{H} \psi_{nlm} \vec{\chi}_{m_s} = \underbrace{\varepsilon_n \psi_{nlm_e} \vec{\chi}_{m_s}}_{\text{Atomanteil}} + \frac{B_z e}{2m_0} \left(\hbar m_e + \hbar g m_s \right) \psi_{nlm_e} \vec{\chi}_{m_s}$$

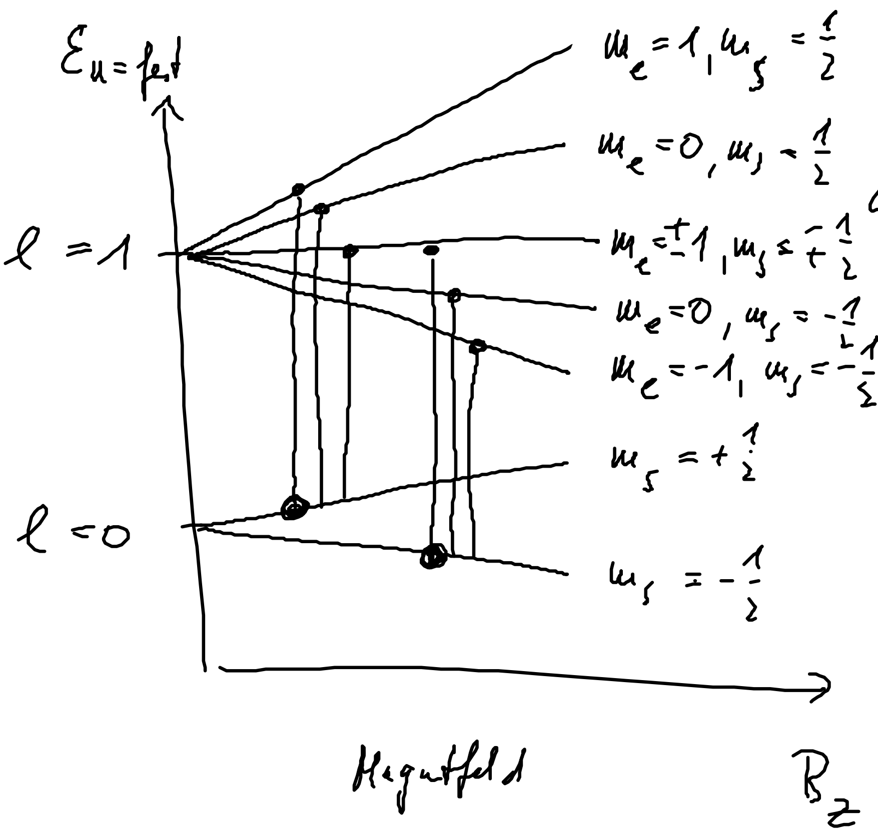
$$\underline{H}_{Atom} \psi_{nlm} = \varepsilon_n \psi_{nlm_e} \qquad \underline{l}_z \psi_{nlm} = \hbar m_e \psi_{nlm_e}$$

$$\left(\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z \right) \qquad \underline{\hat{S}}_z \chi_{m_s} = \hbar m_s \chi_{m_s}$$

Dh. die Eigenfunktion dieser Pauligleichung sind $\psi_{nlm_e} \vec{\chi}_{m_s}$

die Eigenwerte sind $\varepsilon_{n,m_e,m_s} = \varepsilon_n + \frac{B_z e}{2m_0} \left(\hbar m_e + \hbar \underline{g} m_s \right)$

± 1



doppelt entartet (2 Wellenfkt)

$l = 1 \rightarrow m_l = 0, \pm 1, \; m_s = \pm\frac{1}{2}$

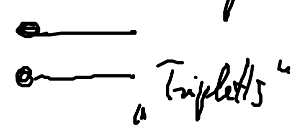
$l = 0 \Rightarrow m_l = 0, \; m_s = \pm\frac{1}{2}$

a) $\frac{eB_z}{2m_0}$ wird Larmorfrequenz genannt

b) Das Magnetfeld hebt die Entartung teilweise auf

c) Test durch optische Spektroskopie und Auswahlregeln

$\Delta m_s = 0$
$\Delta m_l = 0, \pm 1$
$\Delta l = 1$



d) für $l = 0$ wird Stern-Gerlach mit erklärt,
denn für ein räumlich veränderliches Magnetfeld
wird auf die Spinsorte $m_s = \pm\frac{1}{2}$ in ein El-Strahl
eine unterschiedliche Kraft

$$\underbrace{\vec{F} \sim \vec{\nabla} V}_{\text{Mechanik}} \longrightarrow \vec{F} \sim \partial_z \mathcal{E}(B(z)) \sim \partial_z \mathcal{E}^{\pm}_{s=0}$$

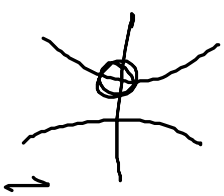
z : Ortskoordinate $\Rightarrow$ verschieden

3.5. Höheren relativistische Korrekturen in der Pauligleichg.

wir betrachten ein Atom bei dem sich Elektron im Kernpotential $\phi = \phi_{Kern}$ bewegt, soll kugelsymmetrisch sein $\phi(|\vec{r}|)$; $\vec{A} = 0$

Diracgleichg. für Kernpotential:

$\vec{p}, \hat{\sigma}$ sind Operatoren



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

$$i\hbar \partial_t \vec{\varphi}_2 = c \vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{p}\, \vec{\varphi}_1 - (2 m_0 c^2 - q\phi) \vec{\varphi}_2$$

Ruhepunktenergie ist bereits abgespalten

also beiden Wellenfkt. $\vec{\varphi}_1$ und Energien kann man direkt mit Schrödingergl. vergleichen.

suche nach stationärem Eigenwertproblem $\vec{\varphi}_i = \underbrace{\vec{\varphi}_i}_{(\vec{r})} e^{-iEt/\hbar}$

$$\left.\begin{aligned} E \vec{\varphi}_1 &= c \vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{p}\, \vec{\varphi}_2 + q \phi \vec{\varphi}_1 \\ \vec{\varphi}_2 &= (E + 2 m_0 c^2 - q\phi)^{-1} c\, \vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{p}\, \vec{\varphi}_1 \end{aligned}\right\} \text{exakt}$$

$q\phi$ sei klein Korrektur gegen Ruheenergie, Taylor 1. Ordnung.

$$E\vec{\varphi}_1 = \frac{1}{2m_0}\vec{\hat{\sigma}}\cdot\vec{p}\underbrace{\left(1-\frac{E-q\phi(\vec{\hat{r}})}{2m_0c^2}\right)}\vec{\hat{\sigma}}\cdot\vec{p}\,\vec{\varphi}_1 + q\phi\vec{\varphi}_1$$

$$\equiv \frac{1}{2m_0}\underbrace{\vec{\hat{\sigma}}\cdot\vec{p}\; f(\vec{r})\;\vec{\hat{\sigma}}\cdot\vec{p}}_{\text{genauer berechnen}}\;\vec{\varphi}_1 + q\phi\vec{\varphi}_1$$

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

$$(i)\;\left(\vec{\hat{\sigma}}\cdot\vec{p}\right)^2 = \hat{1}\,\vec{p}^{\,2} + i\left(\vec{p}\times\vec{p}\right)\cdot\vec{\hat{\sigma}} = \hat{1}\,\vec{p}^{\,2}$$

Identität v. Ü Blatt, letzte VL

Steht in $\underline{H}$ und wirkt auf $\vec{\varphi}_1(\vec{r})$

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

und Produktregel

$$= \underline{f(\vec{r})\,\vec{\hat{\sigma}}\cdot\vec{p}\,\bullet} + \vec{\hat{\sigma}}\cdot\vec{p}\overset{\downarrow}{f}(r)\,\bullet - \underline{f(r)\,\vec{\hat{\sigma}}\cdot\vec{p}\,\bullet}$$

„—" heben sich weg

$$= \frac{\hbar}{i}\,\vec{\hat{\sigma}}\cdot\vec{\nabla}\overset{\downarrow}{f}(r)\,\bullet$$

Kugelsymmetrie: $\vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{\nabla} f(|\vec{r}|) = \vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{e}_r \, \partial_r f(r)$, $\vec{e}_r = \frac{\vec{r}}{r}$

$$= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f(r)}{\partial r} \frac{\vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{r}}{r} .$$

zusammenfassen:

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

(i)

$$(\vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{r})(\vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{p}) = \hat{1} \vec{r} \cdot \vec{p} + i \vec{\hat{\sigma}} \cdot \underbrace{(\vec{r} \times \vec{p})}_{\text{Bahndrehimpuls } \vec{\ell}}$$

Formel übg. oder letzte VL

$$= \hat{1} \frac{\hbar}{i} r \partial_r + i \vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{\ell}$$

wieder zusammenfassen:

$$\vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{p} \; f(r) \; \vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{p} = \hat{1} f(r) \vec{p}^{\,2} - \hbar^2 f'(r) \partial_r + \hbar \frac{f'(r)}{r} \vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{\ell}$$

zurück in die Gleichg. für $\vec{\varphi}_1$:

$$E\vec{\varphi}_1 = \frac{1}{2m_0}\underbrace{\vec{\hat{\sigma}}\cdot\vec{p}\left(1-\frac{E-q\phi(r)}{2m_0c^2}\right)\vec{\hat{\sigma}}\cdot\vec{p}}_{\text{gerade berechnet}}\vec{\varphi}_1 + \hat{1}q\phi\vec{\varphi}_1$$

$$E\vec{\varphi}_1 = \hat{1}q\phi\vec{\varphi}_1 + \underbrace{\frac{1}{2m_0}\left(1-\frac{E-q\phi}{2m_0c^2}\right)\vec{p}^{\,2}\vec{\varphi}_1 - \hbar^2\frac{q\phi'(r)}{4m^2c^2}\partial_r\vec{\varphi}_1 + \frac{q\phi'(r)}{2m^2c^2r}\underbrace{\frac{\hbar}{2}\vec{\hat{\sigma}}}_{\vec{\hat{S}}}\cdot\vec{l}\,\vec{\varphi}_1}$$

leider implizit für E, konsistente Störungstheorie bis 1. Ordnung:

$$E\vec{\varphi}_1^{(0)} = \underbrace{\left(\frac{p^2}{2m}+q\phi\right)}_{\text{für } E \text{ auf die rechte Seite einsetzen}}\vec{\varphi}_1^{\,0}$$

$$E\varphi_1 = \left(\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m_0}+q\phi\right)\vec{\varphi}_1 - \frac{\vec{p}^{\,4}}{8m_0^3c^3}\vec{\varphi}_1$$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2 q\, \phi'}{4m^2c^2}\, \partial_r \vec{\varphi}_1}_{\text{Ableitg. ohne „}i\text{“}} + \frac{q\, \phi'(r)}{2m^2c^2 r}\, \hat{\vec{s}} \cdot \vec{\ell}\, \vec{\varphi}_1$$

Ableitg. ohne „i“

nicht wie bei Impuls

$\rightarrow$ nichthermitischer Term

man behebt das durch Symmetrisierg

$$\int dr\, r^2 \varphi_1^*(r)\, \underbrace{\partial_r \phi(r)}_{\phi'} \partial_r \varphi_1(r) \rightarrow$$

partielle Integration

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

behandle beide Größen analog

(gesternte u. nichtgesternte)

$$= \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} dr \left(\underbrace{r^2 \varphi_1^* \partial_r \phi\, \partial_r \varphi_1}_{\text{heben}} - \varphi_1^* \partial_r \left(r^2 \partial_r \phi\right) \varphi_1 - \underbrace{\varphi_1^* r^2 \partial_r \phi\, \partial_r \varphi_1}_{\text{sich weg}} \right)$$

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

$$= -\frac{1}{2}\int dr\, r^2 \varphi_1^* \, \Delta \phi_{Kern}(r) \, \varphi_1$$

$$\Delta \phi_{Kern} = -\frac{\rho_{Kern}}{\varepsilon_0}$$

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

Poissongleichg. f. Kernladg.

Daher in $\underline{H}$ $\quad \partial_r \phi \, \partial_r \vec{\varphi}_1 \Longrightarrow \frac{1}{2\varepsilon_0} \rho_{Kern}(r) \, \vec{\varphi}_1$

Gesamtergebnis:

$\underline{H}$ mit relativistischen Korrekturen setzt sich zusammen aus:

$$\underline{H}_0 = \left[\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m_0} + q\,\phi_{Kern}(r)\right]\hat{1}$$

Schrödingeranteil des H-Atom: Ψ_{nlm}, E_n ergibt

$$H_{rel}^{kin} = -\frac{\vec{p}^{\,4}}{8m_0^3c^2}\,\hat{1}$$

erste Term in einer Reihe für die kinetische Energie aus der relativistischen Energie-Impuls Beziehung

$$H_{rel}^{SB} = \underbrace{\frac{q\,\partial_r \phi_{Kern}(r)}{2m_0^2c^2 r}}_{\text{Funktion von } \vec{r}} \; \hat{\vec{s}} \cdot \vec{\ell}$$

Spin-Bahn-Kopplg., Produkt aus $\underline{\text{Spin}}$operator und $\underline{\text{Bahn}}$drehimpuls naives Bild: im Ruhesystem d. Elektrons wirkt Proton als Strom dh. als Magnetfeld und dieses koppelt wie $\vec{B}\cdot\vec{\sigma}$ in der Paligleichung

$\sim \vec{\ell}$

$$H_{rel}^{Darwin} = -\frac{\hbar^2 q \rho_{Kern}(r)}{8 m_0^2 c^2 \varepsilon_0}$$

Darwin Term:

Elektron als Ladungswolke sieht Fluktuationen des Kernpotentials, dies führt zu einer „Zitterbewegung".

$$\phi = \phi_0 + \delta r\,\phi' + \delta r^2\,\phi''$$

$$\langle\phi\rangle = \langle\phi_0\rangle + \underbrace{\langle\delta r\rangle}_{=0}\phi' + \langle\delta^2 r\rangle\,\phi''$$

Polarisierf.

entscheidend, verwendeter Term

„Brownsche Bewg."