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. $q = -e$, $e > 0$

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

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

Schrödingergl.: $\underline{H}_{Atom}\,\Psi_{nlm_\ell} = E_n\,\Psi_{nlm_\ell}$ n, l, m Quantenzahl

Pauligl.: $\underline{H}\,\vec{\varphi}_1 = \varepsilon\,\vec{\varphi}_1$

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

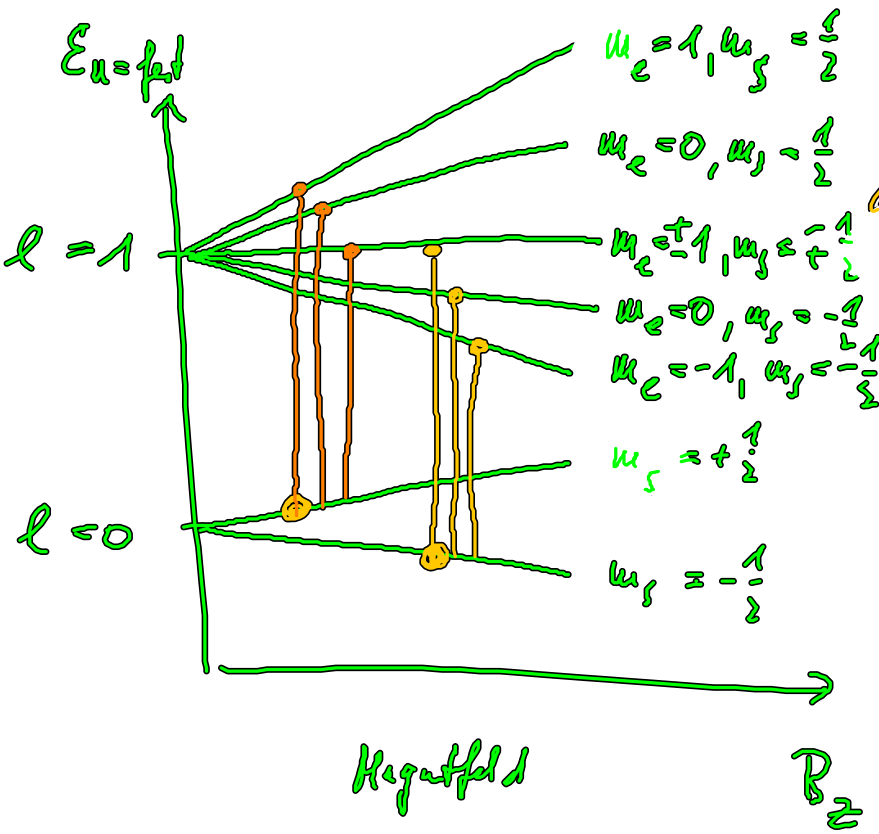
$$\underline{H}\,\Psi_{nlm}\,\vec{\chi}_{m_s} = \underbrace{\varepsilon_n\,\Psi_{nlm_\ell}\vec{\chi}_{m_s}}_{\text{Atomanteil}} + \frac{B_z e}{2m_0}\left(\hbar m_\ell + \hbar g\, m_s\right)\Psi_{nlm_\ell}\vec{\chi}_{m_s}$$

$$\underline{H}_{Atom}\,\Psi_{nlm} = \varepsilon_n\,\Psi_{nlm_\ell} \qquad \underline{\ell}_z\,\Psi_{nlm} = \hbar m_\ell\,\Psi_{nlm_\ell}$$

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

D.h. die Eigenfunktion dieser Pauligleichung sind $\Psi_{nlm_\ell}\,\vec{\chi}_{m_s}$

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



± 1

doppelt entartet (2 Zustände)

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

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

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

b) Das Magnetfeld hebt die Entartung teilweise auf

c) Test durch optische Spektroskopie und Auswahlregeln

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

„Tripletts"

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

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

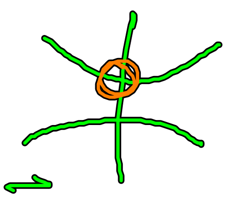
z: Ortskoordinate $\rightarrow$ verschieden

3.5. Höhere 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



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

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

Ruhemassenenergie ist bereits abgespalten

alle 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.

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

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

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

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

Identität v. Ü-Blatt, letzte VL

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

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

und Produktregel

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

$\underline{\quad}$ heben sich weg

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

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)

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

Formel übg. od letzt VL

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

wieder zusammenfassen:

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

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

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

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

$$- \hbar^2\frac{q\phi'(r)}{4m^2c^2}\partial_r\vec{\varphi}_1$$

$$+ \frac{q\phi'(r)}{2m^2c^2r}\underbrace{\frac{\hbar}{2}\vec{\hat{\sigma}}}_{\vec{\hat{S}}}\cdot\vec{\ell}\,\vec{\varphi}_1$$

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

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

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

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

nicht wie bei Impuls

→ nicht hermitischer Term

man behebt das durch Symmetrisierung

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

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

(gestrichene u. nicht gestrichene)

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Spin-Bahn-Kopplg., Produkt aus Spinoperator und Bahndrehimpuls

<u>neues Bild:</u> im Ruhesystem d. Elektrons wirkt Proton als Strom dh. als Magnetfeld und dieses koppelt an $\vec{B} \cdot \vec{\sigma}$ in der Paulingleichung

$\sim \vec{l}$

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

<u>Darwin Term:</u> Elektron als ladungswolke sieht Fluktuationen des Kernpotentials, dies führt zu einer „Zitterbewegung".

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

<u>Poisson-Gl.</u>

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

entscheidend,
verwandter Term
„Brownsche Bewg."