Wh.: aus der Dirac-Theorie für 4-er Spinor $\underline{\psi} = \begin{pmatrix}\underline{\varphi}_1\\ \underline{\varphi}_2\end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix}\underline{\varphi}_1\\ \underline{\varphi}_2\end{pmatrix} = e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t}\begin{pmatrix}\tilde{\underline{\varphi}}_1\\ \tilde{\underline{\varphi}}_2\end{pmatrix}$$ einsetzen (in die Dirac-Gl. mit elektromagnet. Feld)

Herleitung Pauli-Gleichung: $q\phi \ll 2m_0c^2$, $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\tilde{\underline{\varphi}}_2 \ll 2m_0c^2\, \tilde{\underline{\varphi}}_2$

Vektorpotential — Skalares Potential

$$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\underline{\varphi}}_1 = \underbrace{\left(\frac{(\hat{\underline{p}} - \frac{q}{c}\underline{A})^2}{2m_0} + q\phi\hat{1}\right)\tilde{\underline{\varphi}}_1}_{\text{sieht aus wie in der nicht-relativist. SG!}} - \underbrace{\frac{q}{c}\frac{\hbar}{2m_0}\hat{\underline{\sigma}}\cdot\underbrace{\underline{B}}_{\nabla\times\underline{A}}\,\tilde{\underline{\varphi}}_1}_{\text{relativist. Korrektur}}$$

„grosse Komponente" des Vierer-Spinors

Zweikomponentige Gl.!

Notation: $\tilde{\underline{\varphi}}_1 \to \underline{\varphi} = \begin{pmatrix}\varphi_+\\ \varphi_-\end{pmatrix}$ „Pauli-Spinor"

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

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

mit $$\boxed{\hat{H}^{Pauli} = \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m_0} + q\phi - \frac{q}{2m_0c}(\hat{\underline{L}} + 2\hat{\underline{S}})\cdot\underline{B}}$$

Bemerkungen

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

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

mit $$\hat{\underline{\mu}} = \hat{\underline{\mu}}_{Bahn} + \hat{\underline{\mu}}_{Spin} = \frac{q}{2m_0c}\Big(\underbrace{\hat{\underline{L}}}_{\text{Bahndrehimpuls}} + 2\underbrace{\hat{\underline{S}}}_{\text{Spin}}\Big)$$

Speziell zum Spin-Anteil

Anteil des Bahndrehimpulses: Wie in der Schrödinger-Theorie (Zeeman-Effekt!)

$$\hat{\underline{\mu}}_{spin} = 2 \cdot \frac{q}{2m_0 c} \hat{\underline{S}} \stackrel{!}{=} g \cdot \frac{q}{2m_0 c} \hat{\underline{S}} \quad \text{mit} \quad g = 2$$

Ergebnis aus der Pauli-Theorie!

„Lande-Faktor"

Elektron $q = -e_0$ Elementarladung

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

Anwendung auf Wasserstoffatom (H-Atom)

nicht-relativistisch: $\hat{H}^H = \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m} + q\phi(\underline{r})$ mit $q\phi(\underline{r}) = -\frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ Coulombpotential

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

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

Sei $\underline{B} = B\underline{e}_z$ $\Rightarrow [\hat{H}^H, \hat{\underline{L}}] = 0$, $[\hat{H}^H, \hat{\underline{S}}] = 0$

Rotationssymmetrie

nicht-relativist. Hamiltonian: "weiß nichts" von Spin

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

$$\underline{\psi} = \underbrace{\psi_{nlm}(\underline{r})}_{} \cdot \underline{\chi}_{m_s}$$

Pauli-Spinor (2-komponentig)

Spinfunktion (Eigenfunktion von $\hat{\underline{S}}$)

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

"normale" H-Atom Wellenfunktion (charakterisiert durch die Quantenzahlen) n, l, m

$m = -l, \dots, l$

Erinnerung: $s = \frac{1}{2}$ $\Rightarrow m_s = \pm\frac{1}{2}$

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

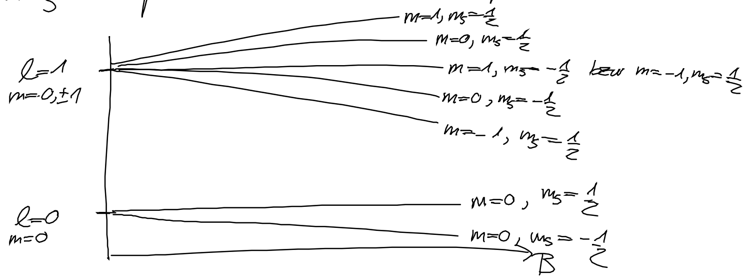
Stationäre Gleichung im äußeren Feld $\underline{B} = B\hat{\underline{e}}_z$

$$\hat{H}^{Pauli}\varphi = \underbrace{\left(\varepsilon_n + \frac{Be_0}{2m_0 c}(\hbar m + 2\hbar m_s)\right)}_{\text{Gesamter Energieeigenwert}}\varphi$$

dabei haben wir benutzt:

$$\hat{H}^H \varphi = \varepsilon_n \varphi \qquad \left(\varepsilon_n \sim -\frac{1}{n^2}\right)$$
$$\hat{\underline{L}}\, \varphi = \hbar m\, \varphi$$
$$\hat{\underline{S}}\, \varphi = \hbar m_s\, \varphi$$

im Vergleich zum nicht-relativist. Fall:
Einbeziehung des Spins zu einer zusätzl. Aufspaltung der Linien!



Energieeigenwerte

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

Wir wissen aber:

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

→ Motivation für Berechnung höherer Korrekturen

Einschub: Klassische Abschätzung der Spin-Bahn-Wechselwirkung

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

$\Rightarrow$ Resultierende Felder im Ruhesystem des Kerns:

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

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

betrachte zwei relativ zueinander bewegte Inertialsysteme

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

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

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

$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-(v/c)^2}}$

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

$\underline{B} = 0$

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

$$\underline{E} = -\underbrace{\phi'}_{\frac{d\phi(r)}{dr}}\frac{\underline{r}}{r} = -\frac{1}{r}\phi'(r)\,\underline{r}$$

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

$$= -\frac{1}{r}\phi'(r)\frac{1}{c^2 m_0}\underline{L} \quad \text{Bahndrehimpuls}$$

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

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

$\Rightarrow$ Zusatzterm im Hamiltonian

$q = -e_0$, quantisierter Drehimpuls

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

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 Einschub

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

Startpunkt: Dirac-Gleichung, spezialisiert auf den Fall $\phi(\underline{r}) \neq 0$ (skalares Potential; hier: Zentralpotential) aber $\underline{A} = 0$

$$\hat{H}_D = c\,\hat{\underline{\alpha}}\cdot\hat{\underline{p}} + \hat{\beta} m_0 c^2 + q\phi\,\hat{1}$$

setze wieder $\Psi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = e^{-i/\hbar\, m_0 c^2 t}\begin{pmatrix} \tilde{\varphi}_1 \\ \tilde{\varphi}_2 \end{pmatrix}$

Einsetzen in die Dirac-Gl.: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat{H}_D\Psi$ (dividiere durch den Zeitfaktor, der die Ruheenergie enthält $e^{-i/\hbar\, m_0 c^2 t}$)

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

noch exakt!

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

$$i\hbar \frac{d}{dt}\tilde{\varphi}_2 = 0$$

(da ~~selbst~~ viel kleiner als die Ruheenergie !)

Jetzt: ordentlicher (noch zu zeigen ...)

Ansatz, um das stationäre Problem zu betrachten

$$\tilde{\varphi}_i(\underline{r},t) = \varphi_i(\underline{r})\, e^{-iEt/\hbar}$$

$i = 1,2$

beachte: E ist die Energie nach Abspaltung der Ruheenergie !!

(das ist nicht einfach $\sqrt{c^2p^2 - m_0^2c^4} - m_0c^2$ wie im freien Fall, weil wir hier Teilchen im Potential betrachten !)

setze Ansatz in $(*)$ ein und dividiere durch $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

1) $E\varphi_1(\underline{r}) = c(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\varphi_2(\underline{r}) + q\phi\,\varphi_1(\underline{r})$ $\qquad (\phi = \phi(r)\;!)$

2) $E\varphi_2(\underline{r}) = c(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\varphi_1(\underline{r}) + q\phi\,\varphi_2(\underline{r}) - 2m_0c^2\varphi_2(\underline{r})$

$$\Leftrightarrow \underbrace{\left(E - q\phi + 2m_0c^2\right)}_{\text{Skalar!}}\varphi_2(\underline{r}) = c(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\varphi_1(\underline{r})$$

auflösen nach $\varphi_2(\underline{r})$ und einsetzen in 1)

$$E\varphi_1(\underline{r}) = c(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\frac{1}{E - q\phi(\underline{r}) + 2m_0c^2}\,c(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\varphi_1(\underline{r}) + q\phi\,\varphi_1(\underline{r})$$

$$\Leftrightarrow E\varphi_1(\underline{r}) = \frac{c(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})}{2m_0c^2}\frac{1}{\left(1 + \frac{E - q\phi(r)}{2m_0c^2}\right)}\,c(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\varphi_1(\underline{r}) + q\phi\,\varphi_1(\underline{r})$$

Benutze: Im nicht-relativist. Grenzfall ist die Größe $\frac{E-q\phi}{2m_0c^2} \ll 1$

benutze jetzt Taylorentwicklung:

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

hier: $x = \frac{E-q\phi}{2m_0c^2}$, $m=-1$

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

(Beachte: Bei der Herleitung der Pauli-Gl. hatten wir gesetzt $E \ll m_0c^2$, $q\phi \ll m_0c^2$

gleich Null gesetzt!

$\Rightarrow x = 0$ ("0.te Ordnung"))

Jetzt gehen wir bis zu erster Ordnung in x !

aus 1)

$$\boxed{E\varphi_1(\underline{r}) \approx \frac{1}{2m_0}(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\left(1-\frac{E-q\phi(\underline{r})}{2m_0c^2}\right)(\hat{\underline{\sigma}}\cdot\hat{\underline{p}})\underline{\varphi}_1(\underline{r}) + q\phi\,\underline{\varphi}_1(\underline{r})}$$