Darwin-tag és a spin-pálya kölcsönhatás

A Dirac egyenlet:

$$\left[c\vec{\alpha}\left(\vec{p}-q\vec{A}\right)+q\phi+\beta mc^2\right]\psi=E\psi$$

Vezessük be a kis- és nagykomponenst $\psi=\begin{pmatrix}\chi\\ \varphi\end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix}E-mc^2-q\phi & -c\vec{\sigma}\vec{K}\\ -c\vec{\sigma}\vec{K} & E+mc^2-q\phi\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\chi\\ \varphi\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix}$$

$$\Downarrow$$

$$\left(W-mc^2-q\phi\right)\chi-c\vec{\sigma}\vec{K}\varphi=0 \quad ,$$

$$\left(W+mc^2-q\phi\right)\varphi-c\vec{\sigma}\vec{K}\chi=0 \quad .$$

$$\varphi=\frac{c\vec{\sigma}\vec{K}\chi}{\underbrace{E+mc^2-q\phi}_{2mc^2}}\approx\frac{1}{2mc}\vec{\sigma}\vec{K}\chi$$

Darwin-tag és a spin-pálya kölcsönhatás

Tudjuk, hogy: $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k$. Mutassuk meg, hogy:

$$\vec{K} \times \vec{K} = -\frac{\hbar q}{i} \vec{B} \ ,$$

ahol a $\mathbf{K}$ kinetikus impulzus: $\mathbf{K} = \mathbf{p} - q\mathbf{A}$. Vezessük le a következő összefüggést:

$$\left[E' - q\phi - \frac{1}{2m} \left(\vec{\sigma} \vec{K} \right) \left(\vec{\sigma} \vec{K} \right) \right] \chi = \left[E' - q\phi - \frac{1}{2m} \vec{K}^2 - \frac{i}{2m} \left(\vec{K} \times \vec{K} \right) \vec{\sigma} \right] \chi$$

$$= \left[E' - q\phi - \frac{\vec{K}^2}{2m} + \frac{\hbar q}{2mc} \vec{B} \vec{\sigma} \right] \chi = \left(E' - H_P \right) \chi = 0 \ ,$$

ahol $E' = E - mc^2$. Az utolsó tag az előző egyenletben a Pauli Schrödinger egyenlet a nagykomponensre, kiegészítve a paramágneses taggal.

Darwin-tag és a spin-pálya kölcsönhatás

Térjünk vissza pár lépéssel előbbre:

$$\left(W - mc^2 - q\phi\right)\chi - c\vec{\sigma}\vec{K}\varphi = 0$$
$$\left(W + mc^2 - q\phi\right)\varphi - c\vec{\sigma}\vec{K}\chi = 0$$

Fejezzük ki ismét a kiskomponenst:

$$\varphi = \frac{c\vec{\sigma}\vec{K}\chi}{E + mc^2 - q\phi} = \frac{c\vec{\sigma}\vec{K}\chi}{E' + 2mc^2 - q\phi} = \frac{1}{2mc^2}\left(1 + \frac{E' - q\phi}{2mc^2}\right)^{-1} c\vec{\sigma}\vec{K}\chi$$
$$\varphi \simeq \frac{1}{2mc^2}\left(1 - \frac{E' - q\phi}{2mc^2}\right) c\vec{\sigma}\vec{K}\chi$$

Helyettesítsük be a nagy komponens egyenletébe:

$$\left(E' - q\phi\right)\chi = \frac{1}{2m}\vec{\sigma}\vec{K}\left(1 - \frac{E' - q\phi}{2mc^2}\right)\vec{\sigma}\vec{K}\chi\,,$$

Darwin-tag és a spin-pálya kölcsönhatás

$$(E' - q\phi)\,\chi = \frac{1}{2m}\vec{\sigma}\vec{K}\left(1 - \frac{E' - q\phi}{2mc^2}\right)\vec{\sigma}\vec{K}\chi\ ,$$

Átrndezve:

$$\begin{aligned}
E'\chi &= H_P\chi - \frac{1}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\vec{K}\ (E' - q\phi)\ \vec{\sigma}\vec{K}\ \chi \\
&= H_P\chi - \frac{1}{4m^2c^2}\left(\vec{\sigma}\vec{K}\right)\left(\vec{\sigma}\vec{K}\right)(E' - q\phi)\,\chi - \frac{1}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\vec{K}\left[E' - q\phi, \vec{\sigma}\vec{K}\right]\chi \\
&= H_P\chi - \frac{1}{2mc^2}\left(H_P - q\phi\right)\left(E' - q\phi\right)\chi - \frac{1}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\vec{K}\left[\vec{\sigma}\vec{K}, q\phi\right]\ .
\end{aligned}$$

Az egyenlet második tagja $1/c^2$ rendigközelíthető mint

$$H_M \equiv -\frac{1}{2mc^2}\left(H_P - q\phi\right)^2\chi \simeq -\frac{1}{8m^3c^2}K^4\chi \quad . \tag{1}$$

Ez a járulék a *relativisztikus tömegnövekedést* (kinetikus energia korrekciót) írja le, hiszen

$$E' - q\phi = \sqrt{m^2c^4 + K^2c^2} - mc^2 \simeq \frac{K^2}{2m} - \frac{1}{8m^3c^2}K^4 + \dots \tag{2}$$

Hidrogén atom energia korrekció

Nézzük meg, hogy ez a korrekció mennyiben befolyásolja a hidrogén atom energiaszintjeit az időfüggetlen perturbációszámítás elsőrendjében:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \quad , \quad E_n^{(0)} = -\frac{m\left(Ze^2\right)^2}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{1}{2} mc^2 \alpha^2 \frac{Z^2}{n^2} \quad ,$$

ahol $\alpha = e^2/\hbar c = \hbar / mca_0$ a finomszerkezeti állandó,

$$H_1 = -\frac{p^4}{8m^3c^2} = -\frac{1}{2mc^2}\left(H_0 + \frac{Ze^2}{r}\right)^2 = -\frac{1}{2mc^2}\left(H_0^2 + 2H_0\frac{Ze^2}{r} + \frac{\left(Ze^2\right)^2}{r^2}\right) \, .$$

Innen

$$\delta E_{n\ell m}^{(1)} = \langle n\ell m \,| H_1 |\, n\ell m \rangle$$

$$\delta E_{n\ell m}^{(1)} = -\frac{1}{2mc^2}\left(\left(E_n^{(0)}\right)^2 + 2E_n^{(0)} \underbrace{\left\langle \frac{Ze^2}{r} \right\rangle_{n\ell m}}_{-2E_n^{(0)}} + Z^2e^4 \underbrace{\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{n\ell m}}_{Z^2/\left[a_0^2 n^3 (\ell+1/2)\right]}\right)$$

Hidrogén atom energia korrekció

$$\delta E^{(1)}_{n\ell m} = -\frac{1}{2mc^2}\left(-\frac{3}{4}m^2c^4\alpha^4\frac{Z^4}{n^4} + \alpha^4 m^2 c^4 Z^4 \frac{1}{n^3\left(\ell+1/2\right)}\right) =$$

$$= \underbrace{-\frac{mc^2}{2}\left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2}_{E^{(0)}_n}\left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2\left(\frac{n}{\ell+1/2}-\frac{3}{4}\right) \quad ,$$

azaz a korrekció α^2 nagyságrendű és a főhéjak mellékkvantumszám (ℓ) szerinti felhasadását eredményezi.

Spin-pálya csatolás

Foglalkozzunk a harmadik taggal:

$$-\frac{1}{4m^2c^2}\left(\vec{\sigma}\vec{K}\right)\left(\vec{\sigma}\left[\vec{K},q\phi\right]\right)=-\frac{1}{4m^2c^2}\underline{\vec{K}}\left[\vec{K},q\phi\right]-\frac{i}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\left(\vec{K}\times\left[\vec{K},q\phi\right]\right) \tag{3}$$

A jobboldalon álló első kifejezés az ún. *Darwin tag*hoz ad járulékot, mellyel a későbbiekben foglalkozunk. A (3) kifejezés második tagját tovább alakítjuk,

$$\left(\vec{K}\times\left[\vec{K},q\phi\right]\right)_i=\varepsilon_{ijk}K_j\left[K_k,q\phi\right]=\underbrace{\left[\underbrace{\varepsilon_{ijk}K_jK_k}_{-\frac{\hbar q}{ic}B_i},q\phi\right]}_{=0}-\varepsilon_{ijk}\left[K_j,q\phi\right]K_k$$

$$=-(\underbrace{\left[\vec{K},q\phi\right]}_{=\left[\vec{p},q\phi\right]}\times\vec{K})_i$$

$$=\frac{i}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\left(\left[\vec{p},q\phi\right]\times\vec{K}\right)=\frac{\hbar}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\left(\left[\vec{\nabla}\left(q\phi\right)\right]\times\vec{K}\right) \quad .$$

Spin-pálya csatolás

Az előző oldalról a spin-pálya csatolás korrekciója:

$$H_{sp} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \vec{\sigma} \left(\left(\vec{\nabla} (q\phi) \right) \times \vec{K} \right)$$

Centrális potenciálra

$$\vec{\mathcal{E}} = -\vec{\nabla} \phi(r) = -\frac{d\phi(r)}{dr} \frac{1}{r} \vec{r} \tag{4}$$

és zérus mágneses tér esetén,

$$H_{sp} = \frac{\hbar q}{4m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi(r)}{dr} \vec{\sigma} (\vec{r} \times \vec{p}) = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d(q\phi(r))}{dr} \vec{L}\vec{S} \,, \tag{5}$$