4. Nichtrelativistischer Grenzfall:

Schrödinger-Gleichung ≡ Wasserstoffspektrum

abes: Stern-Gerlach-Versuch (ca 1922)
zeigt internen Freiheitsgrad von Atomen
im Bezug auf ein externes (hier inhomogenes) Magnetfeld ($\hat{=}$ Aufspaltung)

$\Rightarrow$ Erklärungsbedarf führt zur Spintheorie

Dirac-Gleichung ≡ Fundierung des Spins aus dem Nichtrelativistischen Grenzfall

Heute: Herleitung der Pauli-Gleichung aus der Dirac-Gleichung
$\hat{=}$ Schrödingergl. mit Spin

– Kopplung von Atomen an elektromagnetische Felder, um Spektroskopie zu verstehen, dabei Dirac-Gl. zugrunde zu legen, aber auch dem Problem anzupassen; denn wesentliche Effekte sind bereits in der Störungstheorie enthalten
$\hat{=}$ Ableitung von Termen wie Spin-Bahn-Ww. aus der Dirac-Gl.

Einführung der Felder durch die Potentiale

$\underline{A}, \phi \quad \vec{p} \to \vec{p} - q\vec{A}, \quad H \to H + q\phi$

Dirac-Gl. lautet nun:

$$i\hbar\partial_t \vec{\Psi} = \left(c\hat{\alpha}\,(\vec{p} - q\vec{A}) + \beta mc^2 + q\phi\underline{1}\right)\vec{\Psi}$$

β, α = Vektor u. Matrizen

$\vec{A}, \phi$: angelegte Felder von außen
bzw. abgestrahlte Felder des Elektrons

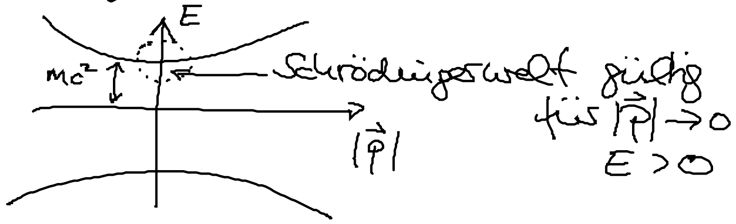
sinnvolle Definition des kanonischen Impulses

$$\boxed{\vec{\pi} \equiv \vec{p} - q\vec{A}}$$

4.1: Näherungsparameter

Herleitung einer „verbesserten" Schrödingergl. aus der Dirac-Theorie

Zweige der Energie-Dispersion



$$\vec{\psi} = (\vec{\varphi}_1, \vec{\varphi}_2)$$

Teilchenartig   Antiteilchenartig

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix}\vec{\varphi}_1\\ \vec{\varphi}_2\end{pmatrix} = c\begin{pmatrix}\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}\,\varphi_2\\ \vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}\,\varphi_1\end{pmatrix} + q\phi\begin{pmatrix}\vec{\varphi}_1\\ \vec{\varphi}_2\end{pmatrix} + mc^2\begin{pmatrix}\vec{\varphi}_1\\ -\vec{\varphi}_2\end{pmatrix}$$

<u>Idee</u>: um in die Schrödingerwelt zu kommen, verschieben wir den Spinor um die Ruheenergie

<u>Ansatz</u>: $$\begin{pmatrix}\vec{\varphi}_1\\ \vec{\varphi}_2\end{pmatrix} = e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t}\begin{pmatrix}\tilde{\vec{\varphi}}_1\\ \tilde{\vec{\varphi}}_2\end{pmatrix}$$

<u>Forderung</u>: $\partial_t \tilde{\vec{\varphi}}_i \ll \frac{mc^2}{\hbar}\tilde{\vec{\varphi}}_i$ (langsam veränderliche) slowly varying envelope approx. SVEA

einsetzen

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix}\tilde{\vec{\varphi}}_1\\ \tilde{\vec{\varphi}}_2\end{pmatrix} = c\begin{pmatrix}\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}\,\tilde{\vec{\varphi}}_2\\ \vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}\,\tilde{\vec{\varphi}}_1\end{pmatrix} + q\phi\begin{pmatrix}\tilde{\vec{\varphi}}_1\\ \tilde{\vec{\varphi}}_2\end{pmatrix} - 2mc^2\begin{pmatrix}0\\ \tilde{\vec{\varphi}}_2\end{pmatrix}$$

SVEA: $\vec{\tilde{\varphi}} \to \vec{\varphi}$ (komponentenweise) Antiteilchen

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

4.2: Herleitung der Pauligl. ohne Spin-Bahn-Kopp.

einfachste Näherung $q\phi\vec{\varphi}_2,\ \dot{\vec{\varphi}}_2 \ll mc^2\vec{\varphi}_2$

$$\vec{\varphi}_2 = \frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}}{2mc}\vec{\varphi}_1$$

$$i\hbar\partial_t \vec{\varphi}_1 = \frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi})^2}{2m}\vec{\varphi}_1 + q\phi\vec{\varphi}_1$$

sieht ähnlich aus wie Schrödingergl.
aber $(\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi})^2$ muss explizit ausgerechnet werden

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{\equiv\sigma_x} \pi_1 + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}}_{\equiv\sigma_y}\pi_2 + \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_{\equiv\sigma_z}\pi_3$$

$p_x - qA_x$

$$= \begin{pmatrix} \pi_3 & \pi_1 - i\pi_2 \\ \pi_1 + i\pi_2 & -\pi_3 \end{pmatrix}$$

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi})^2 = \begin{pmatrix} \pi_3 & \pi_1 - i\pi_2 \\ \pi_1 + i\pi_2 & -\pi_3 \end{pmatrix}^2$$ Ausmultiplizieren

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi})^2\vec{\varphi}_1 = (\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi})^2\ \vec{\varphi}_1(\vec{r},t)$$

Reihenfolge beachten!!

$$= (\ \dots\ )\ \vec{\varphi}_1$$

$$(\ )^2 = \begin{pmatrix} \pi_3^2+\pi_1^2+\pi_2^2 + i(\pi_1\pi_2-\pi_2\pi_1) & (\pi_3\pi_1-\pi_1\pi_3) - i(\pi_3\pi_2-\pi_2\pi_3) \\ \pi_1\pi_3-\pi_3\pi_1 + i(\pi_2\pi_3-\pi_3\pi_2) & (\pi_1^2+\pi_2^2+\pi_3^2) - i(\pi_1\pi_2-\pi_2\pi_1) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \vec{\pi}^2 & 0 \\ 0 & \vec{\pi}^2 \end{pmatrix} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & [\pi_3,\pi_1] \\ -[\pi_3,\pi_1] & 0 \end{pmatrix}}_{\sigma_y} +$$

$$+ i \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -[\pi_3,\pi_2] \\ -[\pi_3,\pi_2] & 0 \end{pmatrix}}_{\sigma_x} + i \underbrace{\begin{pmatrix} [\pi_1,\pi_2] & 0 \\ 0 & -[\pi_1,\pi_2] \end{pmatrix}}_{\sigma_z}$$

$$= \begin{pmatrix} \vec{\pi}^2 & 0 \\ 0 & \vec{\pi}^2 \end{pmatrix} + i\hat{\sigma}_y [\pi_3,\pi_1] - i\hat{\sigma}_x [\pi_3,\pi_2] + i\sigma_z [\pi_1,\pi_2]$$

$$\begin{vmatrix} \sigma_x & \sigma_y & \sigma_z \\ \pi_1 & \pi_2 & \pi_3 \\ \pi_1 & \pi_2 & \pi_3 \end{vmatrix} = \ldots$$

$$= \begin{pmatrix} \vec{\pi}^2 & 0 \\ 0 & \vec{\pi}^2 \end{pmatrix} + i\,(\vec{\pi}\times\vec{\pi})\cdot\vec{\sigma}$$

$$(\ )^2 \vec{\varphi}_1 = \left[\begin{pmatrix} \vec{\pi}^2 & 0 \\ 0 & \vec{\pi}^2 \end{pmatrix} + i\,(\vec{\pi}\times\vec{\pi})\cdot\vec{\sigma}\right] \vec{\varphi}_1$$

$$\underline{i\hbar\,\partial_t \vec{\varphi}_1} = \frac{\mathbb{1}}{2m}\pi^2 \vec{\varphi}_1 + \underline{\underline{\frac{1}{2m} i\,\vec{\sigma}\cdot(\vec{\pi}\times\vec{\pi})\,\vec{\varphi}_1}} + \underline{q\phi\mathbb{1}\vec{\varphi}_1} \qquad \left(\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right)$$

$- - - - - \equiv$ Schrödingergl.

$=\!=\!=\!=\; \equiv$ relativistische Korrektur

$$[\vec{\pi}\times\vec{\pi}]^i \vec{\varphi}_1(\vec{r},t) =$$

$$= [(\vec{p}-q\vec{A})\times(\vec{p}-q\vec{A})]^i \vec{\varphi}_1(\vec{r},t)$$

$$= [-q\vec{A}\times\vec{p} - q\vec{p}\times\vec{A}]^i \vec{\varphi}_1(\vec{r},t) \quad \Big| \begin{array}{l}(\vec{A}\times\vec{A})=0\\ (\vec{p}\times\vec{p})=0\end{array}$$

$$= -\frac{q\hbar}{i}\left(\varepsilon^{ijk}A_j\partial_k + \varepsilon^{ikj}\partial_k A_j\right)\vec{\varphi}_1$$

j,k werden summiert

$$= -q\frac{\hbar}{i}\varepsilon^{ijk}\left(A_j\partial_k - \underbrace{\partial_k A_j\right)\vec{\varphi}_1}_{(\partial_k A_j)\vec{\varphi}_1 + A_j\partial_k\vec{\varphi}_1}$$

$$= -q\frac{\hbar}{i}\varepsilon^{ijk}(-\partial_k A_j)\vec{\varphi}_1 \qquad (\vec{B}=\nabla\times\vec{A})$$

$$= -\frac{q\hbar}{i}\varepsilon^{ikj}(\partial_k A_j)\vec{\varphi}_1 = -\frac{q\hbar}{i}B^i\vec{\varphi}_1$$

damit ergibt sich die Pauli-Gl. als relativistische Korrektur

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

$$\begin{pmatrix}\varphi_+\\ \varphi_-\end{pmatrix} \qquad -\frac{q\hbar}{2m}(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})\vec{\varphi}_1 = \vec{H}_{Pauli}\vec{\varphi}_1$$

$\frac{q}{2m} \rightarrow$ Bohrsche Magneton

4.3: Umeichung der Lagrangefunktion: Übungszettel 3

4.4 Bsp. für die Anwendung
Zeemanneffekt in starken Magnetfeldern
(weitere Korrekturen: Darwin-Term
Spin-Bahn-Kopplung)

$$\vec{\varphi}_1 = \varphi_{nlm}(\vec{r})\,\vec{\chi}_{m_s}$$

Ansatz — Lösung vom Wasserstoffproblem — Spinfreiheitsgrad

$$\chi_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{B} = B_z \vec{e}_z$$

$$\underline{H} = \left(\frac{1}{2m}\vec{p}^{\,2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \right)\mathbb{1} + \frac{e}{2m}\Big(\underbrace{L_z}_{\text{Drehimpuls}} \mathbb{1} + 2 \underbrace{S_z}_{\frac{\hbar}{2}\sigma_z} \Big) B_z$$

$$\underline{H}\,\varphi_{nlm}\vec{\chi}_{m_s} = \underbrace{\Big(\underbrace{E}_{\text{Wasserstoff-Energien}} + \frac{B_z e}{2m}\big(\hbar m_l + \underbrace{2}_{\text{gyromagnetische Faktor}}\hbar m_s\big) \Big)}_{\text{Energie des Wasserstoffatoms im Magnetfeld}} \varphi_{nlm}\vec{\chi}_{m_s}$$