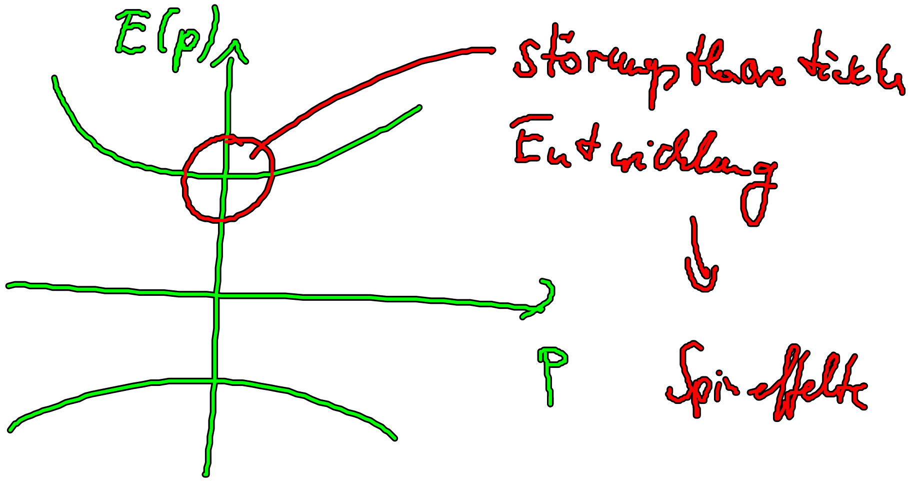
Zweikomponenten-Diracgleichung mit abgetrennter Ruheenergie

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

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



3.2. Der einfachste Fall: Pauligleichung

Idee: energetische Skala klein gegen die Ruheenergie mc^2

$$\dot{\vec{\varphi}} \ll \frac{mc^2}{\hbar}\vec{\varphi}\,, \quad q\phi \ll mc^2$$

$$\vec{\varphi}_2 = \frac{\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\Pi}}{2mc}\,\vec{\varphi}_1\,,$$ in Gleichung für $\vec{\varphi}_1$ eingehen

→ geschlossene Gleichung für $\vec{\varphi}_1$

$$i\hbar\,\partial_t \vec{\varphi}_1 = \underbrace{\frac{(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\pi})^2}{2m}}_{\text{modifizierte kinetische Energie}}\,\vec{\varphi}_1 + q\phi\,\vec{\varphi}_1$$

Schrödingergleichung: $(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\pi})^2 \to \vec{p}^{\,2}$

$$(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{a})(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{b}) = \hat{1}\,\vec{a}\cdot\vec{b} + i\,\hat{\vec{\sigma}}\,(\vec{a}\times\vec{b})$$

ist bewiesen im Tutorium

$$\vec{\pi} = \vec{p} - q\vec{A} = \vec{a} = \vec{b}$$

in Formel

$$i\hbar\,\partial_t \vec{\varphi}_1 = \frac{\hat{1}}{2m}\,\vec{\pi}^{\,2}\vec{\varphi}_1 + i\,\underline{(\vec{\pi}\times\vec{\pi})}\cdot\hat{\vec{\sigma}}\;\vec{\varphi}_1 + q\phi\,\vec{\varphi}_1$$

$$(\vec{\pi}\times\vec{\pi})^i_o = \left[(\vec{p} - q\vec{A})\times(\vec{p} - q\vec{A})\right]^i_o$$

i-te Komponente suche $(\quad)^i$

$$= \Big[\underbrace{\vec{p}\times\vec{p}}_{①} \underbrace{- q\,\vec{A}\times\vec{p} - q\,\vec{p}\times\vec{A}}_{} + q^2\underbrace{\vec{A}\times\vec{A}}_{②}\Big]^i$$

$$\vec{p}\times\vec{p}\,,\quad \vec{A}\times\vec{A} \to 0$$

Kreuzprodukt

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

$$= -q\,\frac{\hbar}{i}\,\varepsilon^{ijk}\left(A_j\partial_k - \partial_k A_j\right)\circ$$

Vertauschg. $j \leftrightarrow k$
im ε Tensor

$$= -q\,\frac{\hbar}{i}\,\varepsilon^{ijk}\left(-\partial_k A_j\right)\circ$$

nach Produktregel

$$= -q\,\frac{\hbar}{i}\,\varepsilon^{ikj}\,\partial_k A_j = \left[-q\,\frac{\hbar}{i}\,\vec{D}\times\vec{A}\right]^i = \underline{\underline{-q\frac{\hbar}{i}B_i}}$$

B_i ist die i-te Komponente eines

z.B. von außen angelegten Magnetfelds

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

$$\underbrace{- \frac{q\hbar}{2m}\, \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{B}\; \vec{\varphi}_1}$$

neu! beschreibt die Ankopplung des Spins ($\frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\sigma}}$) an ein Magnetfeld

(Stern-Gerlach-Versuch!)

- oberer Teil ist identisch mit Schrödingergleichung eines Elektrons im äußeren Feld $(\phi, \vec{A})$

Unschön an der Gleichung ist noch, daß eine Kopplung an die Potentiale, nicht an Felder erfolgt,

3.3. Eichtransformation der elektromagnetischen Potentiale, neue Lagrangefunktion

$L \to H$, um $\underset{\sim}{H}$ zu finden

$\underset{\sim}{H}$ ungleich „schön", möchte Felder darin stehen haben

$$L' = L + \frac{d}{dt}\chi(t)$$

diese Umeichung mit $\chi(t) = -q\vec{r}\cdot\vec{A}(0,t)$

$\xleftrightarrow{\text{kein Feldänderg.}}$

$$+\frac{q}{2}\,\vec{r}\cdot\left(\vec{r}\cdot\vec{\nabla}A(0,t)\right)$$

Ort „0" bedeutet A an Stelle des Kerns

atomares System

Diese Transformation führt zum Pauli-Hamiltonian der nur noch die Felder enthält.

$$\underset{\sim}{H}_{Pauli}\,\vec{\varphi}_1 = i\hbar\,\partial_t\,\vec{\varphi}_1$$

$$\underset{\sim}{H}_{Pauli} = \left(\underset{1}{\frac{p^2}{2m}} - \underset{2}{q\vec{r}\cdot\vec{E}} - \underset{3}{\left(\frac{q}{2m}\vec{r}\times\vec{p}\right)\cdot\vec{B}}\right)\hat{1} + q\phi$$

$$- \frac{q}{m} \hat{\vec{S}} \cdot \vec{B} + \frac{q}{2m}\left(\frac{q}{4} \vec{r} \times \left(\vec{r} \times \vec{B}\right)\right) \cdot \vec{B} \, \hat{1}$$

④ ⑤

a) extern Potentiale $\vec{A}, \phi \xrightarrow[L \to L']{} \vec{E}, \vec{B}$ (extern)

b) $q\phi$ ist das Kernpotential

c) ① kinetische Energie ② $-\vec{d} \cdot \vec{E}$ Dipolenergie

③ $\vec{r} \times \vec{p} = \underline{\underline{\ell}}$ ist der Drehimpulsoperator

magnetische Dipolenergie $-\vec{m} \cdot \vec{B}$

die mit dem <u>Bahn</u>drehimpuls verbunden ist

④ Kopplung des Spins an ein externes Magnetfeld

(Stern - Gerlach - Versuch)

⑤ Diamagnetismus, erzeugt indem das Magnetfeld ein magnetisches Moment erzeugt das intrinsisch nicht vorhanden ist

Ladung $-q = e > 0$ ist die Elementarladung

für $q < 0$ (Elektron)

<u>3.4. Naives (z.T. <u>falsches</u>) Beispiel :</u>

Wasserstoffatom im magnetischen Feld

wenn weitere relativistische Korrekturen klein gegen die Spin-Magnetfeld bzw. Bahndrehimpuls-impuls-Magnetfeldkopplung ist

$$\underline{H} = \left(\frac{1}{2m} \vec{p}^{\,2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \right) + \frac{e}{2m} \left(\underline{l}_z + g\, \hat{s}_z \right) B_0$$

kinetische E.   Kernpotential des Protons

$\vec{B} = B_0 \vec{e}_z$

$g = 2$

gyromagnetische Zahl

$g = 2$ in bisheriger Beschreibung,
bessere Theorien (Quantenelektrodynamik)
liefern Werte die > 2 → Test f. Theorie weil
g im Experiment bestimmt werden kann

$\underline{H}\, \vec{\varphi}_1 = \varepsilon\, \vec{\varphi}_1$ stationäre Pauligleichung lösen

$$\vec{\varphi}_1 = \varphi_{nlm}(\vec{r})\,\vec{\chi}_{m_s}, \quad \vec{\chi}_{m_s} = \begin{cases} \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} & m_s = \frac{1}{2} \\ \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} & m_s = -\frac{1}{2} \end{cases}$$

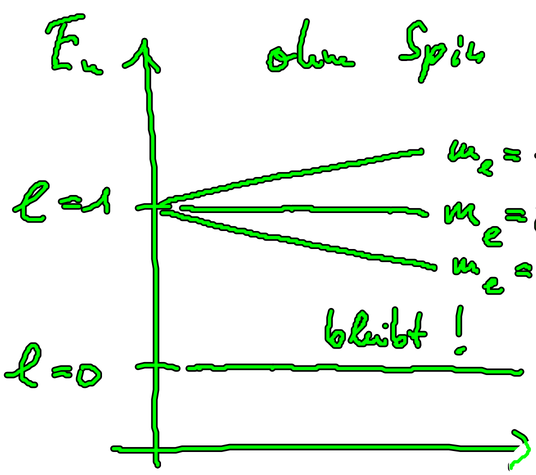
löse diese Gleichung

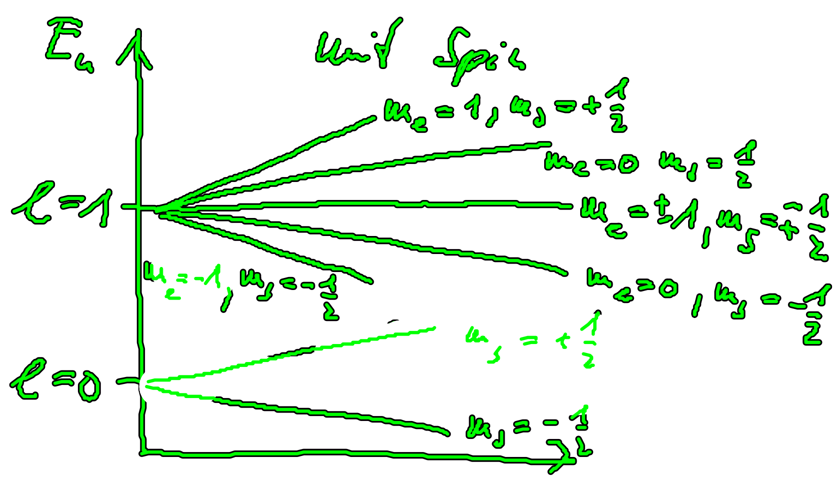
$$\underline{H}\,\varphi_{nlm}\,\vec{\chi}_{m_s} = \Big(\underbrace{\varepsilon_n}_{-\frac{Ry}{n^2}} + \frac{B_0 e}{2m}\left(\hbar m_l + \hbar m_s g\right)\Big)\varphi_{nlm}\,\vec{\chi}_{m_s}$$

Eigenfunktion des
H-Atom Hamiltonians

neue Energie des H-Atoms im Magnetfeld

$$E_n(m_l, m_s) = \varepsilon_n + \frac{B_0 e}{2m}\hbar\left(m_l + m_s g\right)$$





Entartung der $l=1$ Zustände wird aufgehoben

B_0

$(n = \text{fest})$

B_0

reichhaltiges E-Spektrum durch Spin, insbesondere Aufspaltung der $l=0$ artigen Zustände

optisch Spektren dazu später

3.5. Höhere relativistische Korrekturen: Spin-Bahn Kopplung und all das ...

starte erneut von Diracgleichung f. $\vec{\varphi}_1, \vec{\varphi}_2$

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

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

extern Felder abschalten $E, B, \phi_{ext}, A_{ext} \to 0$

ϕ : Kernpotential, z.B. H-Atom

stationäre Lsg.: $\varphi_i \to \varphi_i \, e^{-iEt/\hbar}$

führt zu stationärer Diracgleichung

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

$$\vec{\varphi}_2 = \left(E + 2mc^2 - q\phi\right)^{-1} c\,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}\,\vec{\varphi}_1$$

Also: $\vec{\varphi}_2$ in Gl. für $\vec{\varphi}_1$ einsetzen

$$E\vec{\varphi}_1 = \frac{c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}}{2mc^2}\underbrace{\left(1 + \underbrace{\frac{E-q\phi}{2mc^2}}_{\text{klein}}\right)^{-1}}_{\underbrace{1-\frac{E-q\phi}{2mc^2}}\ \text{(1. Ordng. Taylorreihe)}} c\,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}\,\vec{\varphi}_1 + q\phi\,\varphi_1$$

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

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

(i) $\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}\right)^2 =$ Formel $(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{a})(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{b}) = \hat{1}\,\vec{p}^{\,2}$

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

$$= \underbrace{f(\vec{r})\,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p} + \left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}\, f(r)\right)}_{\text{Produktregel}} - f(r)\,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}$$

$$= \frac{\hbar}{i}\,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\nabla} f(r) = \frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial f(r)}{\partial r}\,\frac{\overbrace{\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{r}}^{\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{e}_r}}{r}$$

kugelsymmetrisch in $\vec{e}_r$-Richtg.

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

$$(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{r})(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}) = \vec{r}\cdot\vec{p} + i\,\hat{\vec{\sigma}}\,(\vec{r}\times\vec{p})$$

$$= \vec{r}\cdot\vec{p} + \underline{\underline{i\,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\ell}}}$$

Kopplg von Spin und Drehimpuls

Zurück in die Gleichg. für φ_1:

$$E\,\vec{\varphi}_1 = \left(\frac{\vec{p}^{\,2}}{\underline{\underline{2m}}} + q\,\phi\right)\vec{\varphi}_1 \quad \Big\{ \text{ Elektron im Kernpotential}$$

$$-\frac{p^4}{8m^3c^2}\,\vec{\varphi}_1 \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Korrektur durch relativistisch} \\ E = E(p)\text{, Wurzel entwickelt} \\ \dfrac{E-q\phi}{2mc^2} \simeq \dfrac{p^2}{4m^2c^2} \quad \text{(erste Näherung)} \end{array} \right.$$

$$-\frac{\hbar^2 q\,\phi'}{4m^2c^2}\,\partial_r\,\vec{\varphi}_1 \quad \left\{ \text{Darwinterm / Kontaktterm} \right.$$

$$+\frac{q\,\phi'}{2m^2c^2 r}\,\vec{\hat{s}}\cdot\vec{\ell}\;\vec{\varphi}_1 \quad \left\{ \text{Spin-Bahn-Drehimpuls-kopplung} \right.$$

$$\text{Darwin} = \frac{\hbar^2 q\,\rho_{\text{kern}}}{8m^2c^2\varepsilon_0}$$ als Umschreibung mögl.

ist wichtig wenn Elektron „Kontakt" mit der Ladungsdichte ρ_{kern} hat (Herleitung liefer ich nach