3. Nichtrelativistischer Grenzfall und erste relativistische Korrekturen zur Schrödingergleichung

a) um Auswirkungen auf die Atomphysik anzusehen benötigen wir Kernpotential ϕ_{Kern} (Proton) und auch die Ankopplung an externe Felder,

d.h. im allgemeinen die Ergänzung der Diracgleichg. mit $\phi, \vec{A}$ (elektromagnetische Potentiale)

b) Korrekturen für stabile Atome sollten klein sein

$\rightarrow$ Ziel: nichtrelativistischer Grenzfall mit $\phi, \vec{A}$

nach Prinzip der lokalen Eichinvarianz:

Man kann Potentiale $\phi, \vec{A}$ in $\underline{H}$ einführen, indem man

$$\underline{H}(\vec{p}) \rightarrow \underline{H}(p - q\vec{A}) + q\phi$$

analog zu Hamiltonfunktion in klassischer Mechanik.

addiert die potentielle Energie

Diracgleichg. mit Potentialen:

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

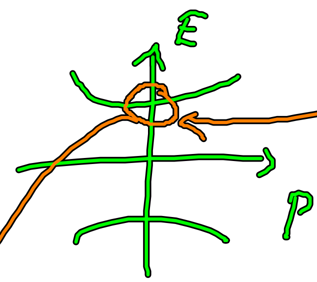
$\vec{\pi} = \left(\vec{p} - q\vec{A} \right)$ verallgemeinerten Impuls einführen

3.1. Nichtrelativistische Näherungen (Idee)

Energiespektrum der Diracgl.

in einem Separationsansatz

$$\psi \sim e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$



Schrödingerwelt

$E \sim p^2$

(de Broglie)

und positive Energien

angeschaut ist Taylorentwicklg. im $\bigcirc$ - Bereich

umsetzen 2 bzg. Koordinaten:

$$\vec{\psi} = \begin{pmatrix} \vec{\varphi}_1 \\ \vec{\varphi}_2 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} \text{Teilchen} \\ \text{Antiteilchen} \end{pmatrix}$$

φ_i : Zweiervektor

$\hookrightarrow$ müssen wir loswerden

$$i\hbar\,\partial_t \begin{pmatrix} \vec{\varphi}_1 \\ \vec{\varphi}_2 \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{\pi}\;\vec{\varphi}_2 \\ \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{\pi}\;\vec{\varphi}_1 \end{pmatrix} + q\phi \begin{pmatrix} \vec{\varphi}_1 \\ \vec{\varphi}_2 \end{pmatrix} + m_0 c^2 \begin{pmatrix} \vec{\varphi}_1 \\ -\vec{\varphi}_2 \end{pmatrix}$$

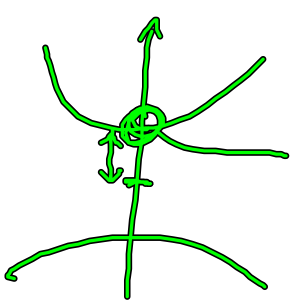
aus Struktur

$$\hat{\alpha}_i = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ \hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}$$

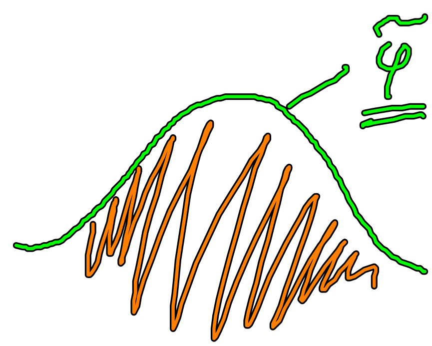
Ansatz:

$$\begin{pmatrix} \vec{\varphi}_1 \\ \vec{\varphi}_2 \end{pmatrix} = \underline{e^{-i\frac{m_0 c^2}{\hbar}t}} \underline{\begin{pmatrix} \tilde{\vec{\varphi}}_1 \\ \tilde{\vec{\varphi}}_2 \end{pmatrix}}$$

$$\sim e^{-i\frac{E_+ t}{\hbar}}\Big|_{p=0}$$



$E_+(p=0)$
$= m_0 c^2$



schnelle Zeitabhängigkeit

mit Fordrg. $\quad \partial_t \tilde{\vec{\varphi}}_{1/2} \ll \tilde{\vec{\varphi}}_{1/2} \dfrac{m_0 c^2}{\hbar}$

die Forderung schränkt die Lösg. auf den Schrödingerbereich ein.

<u>Mittel zu:</u>

$$i\hbar\,\partial_t \begin{pmatrix} \tilde{\vec{\varphi}}_1 \\ \tilde{\vec{\varphi}}_2 \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \vec{\hat{\sigma}}\cdot\vec{\pi}\,\tilde{\vec{\varphi}}_2 \\ \vec{\hat{\sigma}}\cdot\vec{\pi}\,\tilde{\vec{\varphi}}_1 \end{pmatrix} + q\phi \begin{pmatrix} \tilde{\vec{\varphi}}_1 \\ \tilde{\vec{\varphi}}_2 \end{pmatrix} - 2m_0c^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{\vec{\varphi}}_2 \end{pmatrix}$$

<u>in Komponenten schreiben:</u> $\tilde{\varphi} \to \varphi$ (Schreibweise)

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

$$i\hbar\,\partial_t \vec{\varphi}_2 = c\,\vec{\hat{\sigma}}\cdot\vec{\pi}\,\vec{\varphi}_1 + q\phi\,\vec{\varphi}_2 - 2m_0c^2\,\vec{\varphi}_2$$

man macht jetzt Störungstheorie

$$\vec{A};\ \phi \quad i\,\partial_t\varphi \ll \frac{2m_0c^2}{\hbar}\varphi$$

die einfachste Version führt zu Pauligleichung ($\vec{B}\cdot\vec{\hat{S}}$)

höhere Terme führen zur Spin-Bahn Kopplung ($\vec{\ell}\cdot\vec{\hat{S}}$) usw.

<u>3.2. Der einfachste Fall:</u>

<u>Pauli-Gleichung ohne Spin-Bahn-Kopplung.</u>

lasse $q\phi\,\vec{\varphi}_2$ und $\dot{\vec{\varphi}}_2$ gegen $m_0c^2\,\vec{\varphi}_2$

in der zweiten Gleichung weg:

$$\vec{\varphi}_2 = \frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}}{2m_0 c}\,\vec{\varphi}_1 \,,$$ eingesetzt in erste Gleichung:

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

Erinnerung an Schrödinger:

$$i\hbar\,\partial_t\,\Psi = \frac{\vec{\pi}^{\,2}}{2m}\,\Psi + q\phi\,\Psi$$

folgende Vektoridentität nutzen:

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

<u>anwenden:</u>

$$i\hbar\,\partial_t\,\vec{\varphi}_1 = \frac{1}{2m_0}\Big(\underbrace{\vec{\pi}^{\,2}}_{\substack{\| \\ (\vec{p}-q\vec{A})^2 \text{ analog zur Schrödingergleichung}}} + i\,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\left(\vec{\pi}\times\vec{\pi}\right)\Big)\vec{\varphi}_1 + q\phi\,\vec{\varphi}_1$$

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

wirkt auf φ_1

Kreuzprodukt gleicher Vektoren $\to 0$

$$= \left[-q\vec{A} \times \vec{p} - q\,\vec{p} \times \vec{A} \right]^i .$$

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

Def. Impuls $p^k = \frac{\hbar}{i}\partial_k$

fällt mit nur weg

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

$$= +q\frac{\hbar}{i}\varepsilon^{ijk}\left(\partial_k A_j\right) .$$

$$= -q\frac{\hbar}{i}\left(\vec{\nabla} \times \vec{A}\right)^i$$

$$= -q\frac{\hbar}{i} B^i$$ ergibt das magnetische Feld.

bisher :

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

$$- \frac{q\hbar}{2m} \, \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{B} \, \vec{\varphi}_1$$ neu: Kopplg. des Spins an Magnetfeld

$$= H_{Pauli} \, \vec{\varphi}_1$$

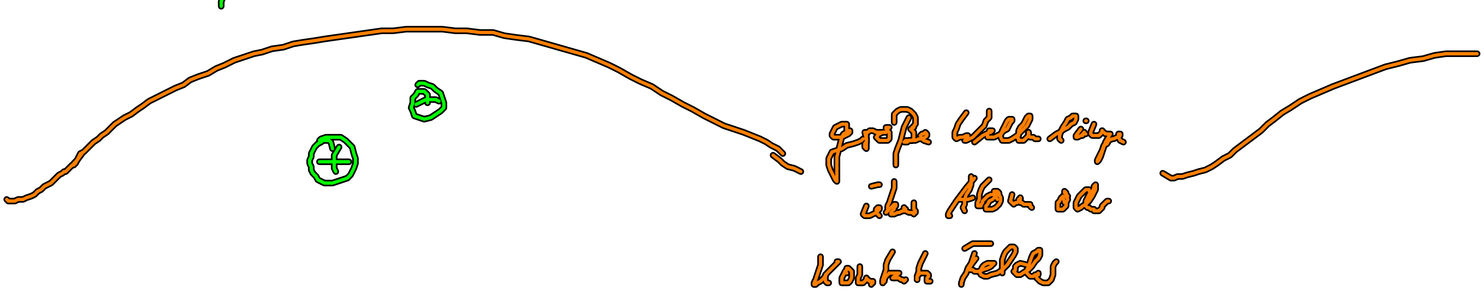
- Der erste Anteil ist analog der herkömmlichen QM, der zweite Anteil koppelt Spin und Magnetfeld und führt in der Atomphysik zu neuen Effekten, z.B. Stern-Gerlach-Versuch.

- unschön: im 1. Teil Potentiale A, ϕ, im 2. Teil Feld B

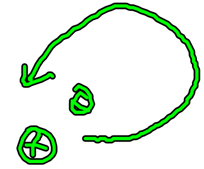
3.3. Eichtransformation der Potentiale

- A, ϕ bzw E, B ist egal solange keine Näherungen gemacht werden
- bei bestimmten Näherungen aber kann das Ergebnis das in $\vec{A}, \phi$ formuliert ist von der Eichung abhängen $\Rightarrow$ unschön.

- es gibt eine Mögl. $\vec{A}\,\phi$ durch $\vec{E}, \vec{B}$ zu ersetzen wenn $\vec{E}, \vec{B}$ räumlich schwach veränderlich sind.



Felder → intern: Selbst-WW Felder



$A, \phi \to E, B$

Felder → extern: von außen angelegt $\longrightarrow \vec{E}, \vec{B}$

problematisch: Potential des Kerns

Unterteilung ab jetzt in schnell veränderliche Felder $\vec{E}, \vec{B}$

statische — " — ϕ_{Kern}

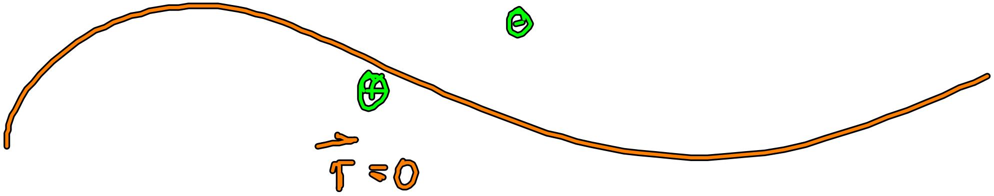
$$\phi, \vec{A} \longrightarrow \vec{E}, \vec{B} \Longrightarrow \text{wie ?}$$

Umrechnung durch Eichtransformation im $\underline{H}$ oder im Lagrangefkt. L

$$L \to L + \frac{d}{dt}\chi \quad \text{erlaubt in klassischer Mechanik}$$

$$\chi(t, \vec{r}) = -q\, \vec{r} \cdot \vec{A}(0, t) + \frac{q}{2}\, \vec{r} \cdot \left(\vec{r} \cdot \vec{\nabla}\, \vec{A}(\vec{r}, t) \right)\Big|_{\vec{r}=0}$$

Atom am Ort $\vec{r} = 0$



χ : Eichfunktion

Anwendg. auf $\underline{H}_{pauli}$ ergibt (siehe Tutorium):

$$\underline{H}_{pauli} = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + q\,\Phi_{kern}$$

Schrödinger-$\underline{H}$ für Atomphysik ($\underline{H}_{atom}$)

$$- q\,\vec{r} \cdot \vec{E}$$

externes angelegtes elektrisches Feld $\vec{E}$ koppelt an Dipol $q\vec{r}$.

$$- \frac{q}{2m}\,\vec{B} \cdot \Big(\underset{①}{\vec{\ell}\,\hat{1}} + g\,\underset{②}{\hat{\vec{S}}} - \underset{③}{\frac{q}{4}\,\vec{r} \times (\vec{r} \times \vec{B})} \Big)$$

externes angelegtes Magnetfeld koppelt an

① Drehimpuls des e $\vec{\ell} = \vec{r} \times \vec{p}$

② Spinmatrixvektor $\frac{\hbar}{2}\,\hat{\vec{\sigma}} = \hat{\vec{S}}$

$g = 2$ gyromagnetischer Faktor

($g > 2$ in QED)

- Bahnmagnetismus
  Drehimpuls koppelt an $\vec{B}$
  paramagnetisch $\chi_m > 0$
- Spinmagnetismus
  - Stern-Gerlach Versuch
  - $\ell = 0$ Zustand

  → Magnetismus

③ extern induzierte mag-fitch Moment (Klammer aus durch $\vec{B}$)

• Art Bahnmagnetismus aber induziert diamagnetisch $\chi_m < 0$

Magnetische Effekte, insbesondere Spin, ist in der Pauligleichg. enthalten