

3.) Nichtrelativistischer Grenzfall

- Kopplung von Atomen an elektromagnetische Felder, um Spektroskopie zu verstehen, dabei Diracgleichung ableiten, weil wesentliche Eigenschaften bereits in Störungstheorie f. relativistische Effekte verstanden werden können

⇐ Ableitung v. Termen wie Spin-Bahn WW aus der Diracgleichung

Einführung des Feldes durch Potentiale ϕ, \vec{A}

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

analog Mechanik.

Diracgleichung eines Elektrons im Potentiale ϕ, \vec{A}

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

$\hat{\alpha}^i$ Vektor v. Matrizen

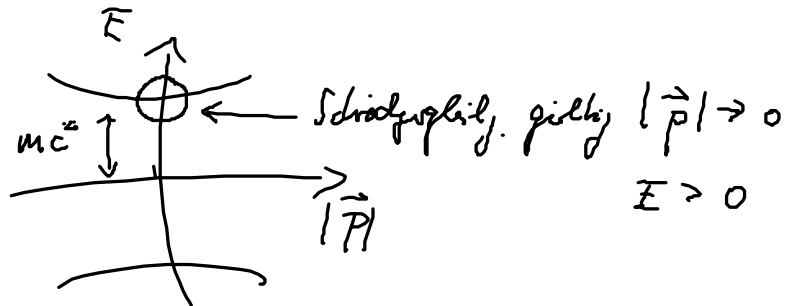
\vec{A}, ϕ : als angelegte Felder v. außen
 bzw. abgeschaltete Felder d. Elektrodes

Sinnvolle Definition $\vec{p} - q \vec{A} \equiv \vec{\pi}$

3.1. Näherungsverfahren

Herleitung einer verbesserten Schrödingergleichung aus Diracgleichung

Zweige d. E-Dispersion



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

↑
"Teilchenartig"

↑
"Antiteilchenartig"

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

Idee: um die Dynamik in \bigcirc zu verschieben, Ansatz:

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

↑
Sicht zu
bestimmen

Forderung: $\partial_t \vec{\tilde{\varphi}}_i \ll \frac{mc^2}{\hbar} \vec{\tilde{\varphi}}_i$

einsetzen:

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

↑
Fälsche

↑
Achtfläche

$\vec{\tilde{\varphi}} \rightarrow \varphi$

Komponentenweise:

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

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

① sehr groß im Vgl. zu
 ② soll inkohärent kop. ermöglichen

3.2. Partikelung über Spin-Bahn Kopplg.

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

$$\vec{\varphi}_2 = \frac{\vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{\pi}}{2mc} \vec{\varphi}_1 \quad \text{Teilchengleichung}$$

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

Sieht ähnlich aus wie Schrödinger bzw. Partikelung,

aber $(\vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{\pi})^2$ muß explizit behandelt werden

$$\vec{G} \cdot \vec{u} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \vec{u}_1 + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \vec{u}_2 + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \vec{u}_3$$

\nearrow
 $\vec{p}_x - q \vec{A}_x$

$$= \begin{pmatrix} \bar{u}_3 & \bar{u}_1 - i\bar{u}_2 \\ \bar{u}_1 + i\bar{u}_2 & -\bar{u}_3 \end{pmatrix}$$

$$\left(\frac{1}{5} \vec{u} \right)^2 = \begin{pmatrix} \bar{u}_3 & \bar{u}_1 - i\bar{u}_2 \\ \bar{u}_1 + i\bar{u}_2 & -\bar{u}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{u}_3 & \bar{u}_1 - i\bar{u}_2 \\ \bar{u}_1 + i\bar{u}_2 & -\bar{u}_3 \end{pmatrix}$$

Reihenfolge der Operatoren beachten,

wirkt auch am Ende auf $\vec{\psi}_x$ ($\vec{\sigma}_i +$)
 \nearrow

$$= \begin{pmatrix} \phantom{\bar{u}_3} & \phantom{\bar{u}_1 - i\bar{u}_2} \\ \phantom{\bar{u}_1 + i\bar{u}_2} & \phantom{-\bar{u}_3} \end{pmatrix}$$

$$\text{Einyl } 1-2 : \underline{\pi_3} (\underline{\pi_1} - i\underline{\pi_2}) + (\underline{\pi_1} - i\underline{\pi_2}) \underline{(-\pi_3)} = a_{12}$$

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

$$= \begin{pmatrix} \underline{\pi}^2 & 0 \\ 0 & \underline{\pi}^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & [\underline{\pi_3}, \underline{\pi_1}] \\ [\underline{\pi_3}, \underline{\pi_1}] & 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & -[\underline{\pi_3}, \underline{\pi_2}] \\ [\underline{\pi_3}, \underline{\pi_2}] & 0 \end{pmatrix}$$

$\sim \hat{\sigma}_y$
 $\sim \hat{\sigma}_x$

$$+ i \begin{pmatrix} [\underline{\pi_1}, \underline{\pi_2}] & 0 \\ 0 & -[\underline{\pi_1}, \underline{\pi_2}] \end{pmatrix}$$

$\sim \hat{\sigma}_z$

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

$$(\vec{\pi})^2 = (\vec{p} - q\vec{A})^2$$

$$\begin{pmatrix} \hat{\sigma}_x & \hat{\sigma}_y & \hat{\sigma}_z \\ \pi_1 & \pi_2 & \pi_3 \\ \pi_1 & \pi_2 & \pi_3 \end{pmatrix}$$

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

in Schröd. f. $\vec{\psi}$ einsetzen:

$$i\hbar \partial_t \vec{\psi} = \frac{\hat{1}}{2m} \vec{\pi}^2 \vec{\psi} + i \underbrace{\vec{\hat{\sigma}} \cdot (\vec{\pi} \times \vec{\pi})}_{\text{relativistisch Korrektur}} \vec{\psi} + q\phi \hat{1} \vec{\psi}$$

Schrödingergleichung

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

gemischte Terme \vec{p}, \vec{A} fallen bei, andere Kreuzprodukte verbleiben

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

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

j, k. wird summiert

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

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

$$= -q \frac{\hbar}{i} \underbrace{\epsilon^{ikj} \partial_k A_j}_{[\vec{\nabla} \times \vec{A}]_i} = -q \frac{\hbar}{i} B^i$$

$$[\vec{\nabla} \times \vec{A}]_i$$

damit ergibt sich die Pauli-Gleichung:

$$i\hbar \dot{\varphi}_{\pm} = \left[\frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + q\phi \right] \varphi_{\pm}$$

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

$$\begin{pmatrix} \varphi_+ \\ \varphi_- \end{pmatrix}$$

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

$$\underline{H} = \underbrace{\left(\frac{1}{2m} \vec{p}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right)}_{\text{H-Atom in Kernpotential } \phi} + \frac{e}{2m_0} \left(l_z \frac{1}{\hbar} + 2 \frac{1}{\hbar} s_z \right) B_z$$

Drehimpuls
aus OH1
(aus A_p Term
von $(\rho - A_p)^2$)
Spinoperator
 $\frac{\hbar}{2} \frac{1}{\hbar} s_z$

$$\vec{\psi}_n = \psi_{nlm} \vec{\chi}_{ms}$$

$$\underline{H} \psi_{nlm} \vec{\chi}_{ms} = \left(\underbrace{\epsilon_n}_{\text{H-Atom Energie}} + \frac{B_z e}{2m} \left(\frac{1}{\hbar} m_l \hbar + 2 \frac{1}{\hbar} m_s \hbar \right) \right) \psi_{nlm} \vec{\chi}_{ms}$$

$\stackrel{1}{=} g$ gyromagnetischer Faktor

Energie d. H-Atoms in Magnetfeld

