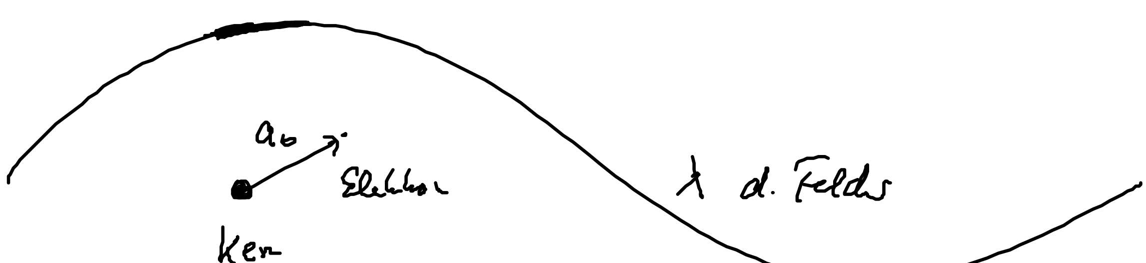
3.3. Eichtransformation der Potentiale

Problem ist typischerweise f. Anwendungen das gemischte Auftreten v. Potentialen <u>und</u> Feldern ($\vec{B}$, $\vec{A}$, $\vec{E}$, ϕ).

kann behoben werden (auf Kosten v. Näherungen) durch Umeichung der Lagrangefunktion

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

<u>Idee für Atome in externen Feldern</u> $\vec{E}, \vec{B}$



Wellenlänge $\lambda \gg a_0$ Bohrscher Radius $\Longrightarrow$

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

d.h. man vernachlässigt die räumliche Abhängigkeit d. Felder

$$\vec{A}(\vec{r},t) \xrightarrow[\vec{r}=\vec{r}_{Atom}]{} \vec{A}(\vec{r}_{Atom} \approx 0, t) \to \vec{A}(0,t)$$

L' berechnen $\to$ H' berechnen

$$H'_{Pauli} = \left(\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + q\,\phi_{Kern}(\vec{r})\right)\underline{\hat{1}}$$ atomarer Hamiltonian

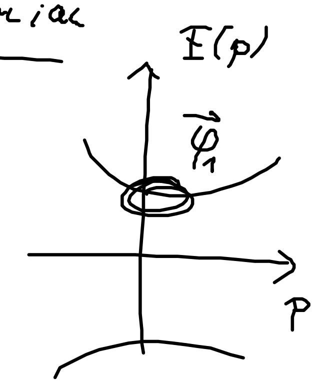
$$\underbrace{-q\,\vec{r}}_{\text{Polarisierung (Dipol)}}\cdot\vec{E}(0,t)\,\underline{\hat{1}}$$ angeregter atomarer Dipol im optischen / statisch elektrischen Feld

$$\underbrace{-\frac{q}{2m}\vec{B}(0,t)\cdot\underbrace{\left(\vec{\ell}\,\underline{\hat{1}} + g\,\hat{\vec{S}}\right)}_{\text{Magnetisierung}}}_{\substack{\text{paramagnetische WW} \\ \text{Suszeptibilität: } \chi_m > 0}}$$ Kopplung d. externen magnet. Feld an Bahndrehimpuls + Spin

$$\underbrace{+\frac{q}{2m}\vec{B}(0,t)\cdot\left(\frac{q}{4}\,\vec{r}\times\left(\vec{r}\times\vec{B}(0,t)\right)\right)\underline{\hat{1}}}_{\substack{\text{diamagnetische WW} \\ \text{Suszeptibilität: } \chi_m < 0}}$$

genaue Rechg. Übung

3.4. Höhere relativistische Korrekturen im Paulihamiltonian



einfacher Fall: Atom ohne externe Felder $\vec A = 0$

Kernpotential $\phi_{\text{Kern}} \neq 0 \equiv \phi$

Start: $i\hbar \partial_t \vec\varphi_1 = c\,\hat{\vec\sigma}\cdot\vec p\,\vec\varphi_2 + q\phi\,\vec\varphi_1$

$$i\hbar \partial_t \vec\varphi_2 = c\,\hat{\vec\sigma}\cdot\vec p\,\vec\varphi_1 - (\underline{2mc^2} - q\phi)\,\vec\varphi_2$$

suche stationäre Lösungen:

$$\vec\varphi_i(\vec r,t) \to \vec\varphi_i(\vec r)\, e^{-iEt/\hbar} \qquad \text{einsetzen}$$

$$\Downarrow \quad E\,\vec\varphi_1(\vec r) = c\,\hat{\vec\sigma}\cdot\vec p\,\vec\varphi_2(\vec r) + \underline{q\phi\,\vec\varphi_1(\vec r)}$$

$$\vec\varphi_2(\vec r) = \left(E + 2mc^2 - q\phi\right)^{-1} c\,\hat{\vec\sigma}\cdot\vec p\,\vec\varphi_1(\vec r)$$

$$E\,\vec\varphi_1 = \frac{c\,\hat{\vec\sigma}\cdot\vec p}{2mc^2}\left(1 + \underbrace{\frac{E - q\phi(\vec r)}{2mc^2}}_{\frac{\text{Energie}}{\text{Ruheenergie}} \ll 1}\right)^{-1} c\,\hat{\vec\sigma}\cdot\vec p\,\vec\varphi_1 + \underline{q\phi\,\vec\varphi_1}$$

$$E\vec{\varphi}_1 \approx \frac{1}{2m}\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}\underbrace{\left(1-\frac{E-q\phi}{2mc^2}\right)}\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}\,\vec{\varphi}_1 + q\phi\vec{\varphi}_1$$

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

diskutieren

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

wegen Nichtvertauschbarkeit v. $\vec{p}$, $f(\vec{r})$

$\quad\uparrow \vec{\nabla}_r$

Nebenrechnung:

(i) $\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}\right)^2 = \underline{1}\,\vec{p}^2 + i\,(\underbrace{\vec{p}\times\vec{p}}_{=0})\cdot\hat{\vec{\sigma}} = \underline{1}\,\vec{p}^2$

$\uparrow$ auch $\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\Pi}\right)^2$ leicht VL

$\quad\uparrow (\vec{p} + \cancel{q\vec{A}})$

$$\text{(ii)}\quad \left[\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}, f(r)\right]\bullet = \hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}\, f(r)\bullet - \underbrace{f(r)\,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}\bullet}_{=0}$$

$$= \frac{\hbar}{i}\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\nabla}_r f(r) \qquad \left(\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right) \qquad \vec{e}_r = \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|}$$

$$= \frac{\hbar}{i}\underbrace{\frac{\partial}{\partial r} f(r)}_{f'} \cdot \frac{\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{r}}{|\vec{r}|} \qquad \vec{\nabla}_r = \vec{e}_r\,\partial_r$$

f. Kugelsymm. Problem

also: $$\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}\; f(r)\; \hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}\,\cdot = \underline{\hat{1}}\, f(r)\, \vec{p}^{\,2}\cdot + \frac{\hbar}{i} f'(r) \underbrace{\frac{\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{r}}{|\vec{r}|}\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}\,\cdot}$$

analog letzte VL

$$(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\underline{\vec{r}})(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\underline{\vec{p}})\cdot = \underline{\hat{1}}\,\vec{r}\cdot\vec{p}\,\cdot + i\hat{\vec{\sigma}}\cdot(\underbrace{\vec{r}\times\vec{p}})\cdot$$

(letzte VL $(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\hat{\Pi}})(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\hat{\Pi}})$)

$$= \underline{\hat{1}}\,\underbrace{\vec{r}\cdot\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_r}_{\frac{\hbar}{i} r\partial_r} + i\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\ell}$$

$$(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p})\, f(r)\, (\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}) = \underline{\hat{1}\, f(r)\, \vec{p}^{\,2}} - \hbar^2 f'(r)\,\partial_r + \hbar\,\frac{f'(r)}{r}\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\ell}$$

↓ einsetzen gibt Eigenwertgl. f. Elektron in Atom mit erster Ordng. relativistischer Korrekturen $f(r) = 1 - \frac{E - q\phi(r)}{2mc^2}$

$$E\vec{\varphi}_1 = \underline{\hat{1} q\phi}\,\vec{\varphi}_1 + \underline{\frac{\hat{1}}{2m}\left(1 - \frac{E-q\phi}{2mc^2}\right)\vec{p}^{\,2}\vec{\varphi}_1}$$

Kernpotential (a)

$$- \underbrace{\hbar^2 \frac{q\phi'}{4m^2c^2}\hat{1}\,\partial_r}\,\vec{\varphi}_1 + \underline{\frac{q\phi'(r)}{2m^2c^2 r}\frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\ell}}\;\vec{\varphi}_1$$

(b) (c)

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

Spin-Bahn-Kopplg. aus QM I

die beiden ersten Korrekturterme werden i.a. zur Behandlung in eine andere Form gebracht:

a) $\frac{(E-q\phi)^2}{2mc^2}\vec{p}\,\cdot = \frac{\vec{p}^{\,4}}{4m^2c^2}\,\cdot$ siehe Übungsblatt

b) durch Näherung bei Taylorreihe ist (b) leider nicht hermitisch $\to$ Problem

man muß den Term „hermitisieren", betrachte Skalarprodukt

$$\int dr\, r^2\, \varphi_1^*(r)\left(\partial_r \phi\, \partial_r\right) \varphi_1(r)$$

partielle Integration

$$\to \frac{1}{2}\left(\int dr\, r^2\, \varphi_1^*\, \partial_r \phi\, \partial_r \varphi_1 + \int dr\, \left(\partial_r \varphi_1^*\right) r^2\, \partial_r \phi\, \varphi_1\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left(\int dr \left(r^2\, \varphi_1^*\, \partial_r \phi\, \partial_r \varphi_1 - \varphi_1^*\, \partial_r\left(r^2 \partial_r \phi\right) \varphi_1 - \varphi_1^*\, r^2 \partial_r \phi\, \partial_r \varphi_1\right)\right)$$

$$= -\frac{1}{2}\int dr\, \underbrace{\frac{r^2}{r^2}}_{1}\, \varphi_1^* \left(\partial_r\left(r^2 \partial_r \phi\right)\right) \varphi_1 = \underbrace{-\frac{1}{2}\int dr\, r^2\, \varphi_1^*\, \Delta\phi\, \varphi_1}_{\text{ist hermitisch}}$$

$$\partial_r \phi \, \partial_r \varphi_1 \longrightarrow -\frac{1}{2} \Delta \phi \, \varphi_1 = \frac{1}{2} \frac{\rho_{Kern}(\vec{r})}{\varepsilon_0} \varphi_1$$

Kernpotential

$$\Delta \phi = -\frac{\rho_{Kern}}{\varepsilon_0}$$

$\rho_{Kern}(\vec{r})$ ist die Kernladungsdichte

Terme aufsammeln ergibt den relativistisch korrigierten Paulihamiltonian

$$H_0 = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + \phi_{Kern}(\vec{r}) \qquad \text{Elektron im Kernpotential}$$

$$H_{rel} = -\frac{\vec{p}^{\,4}}{8m^3c^2} - \frac{\hbar^2 q \rho_{Kern}(\vec{r})}{8m^2c^2\varepsilon_0} + \frac{q \partial_r \phi_{Kern}(\vec{r})}{2m^2c^2 r} \vec{\hat{s}} \cdot \vec{\ell}$$

a b c

$\hat{=}$ relativistische Korrekturen ohne externe Felder

$$H_{\substack{\text{extern}\\\text{elektrisch}}} = -q \vec{r} \cdot \vec{E}(0,t)$$

$$H_{\substack{\text{extern}\\\text{magn.}}} = -\frac{q \vec{B}(0,t)}{2m} \left(\vec{\ell} + g \vec{\hat{s}} - \frac{q}{4} \vec{r} \times (\vec{r} \times \vec{B}(0,t)) \right)$$

alles wo kein Spin steht hat $\underline{1}$ Matrix davor

Interpretation d. relativist. Korrekturen

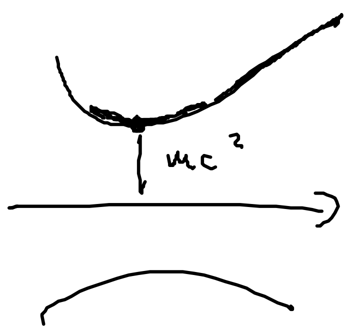
a) $H_a = -\frac{\vec{p}^4}{8m^3c^2}$

Korrektur zur Dispersion d. nichtrelativist. Teilchens.

$$E = \sqrt{m^2c^4 + c^2p^2} = mc^2\sqrt{1 + \underbrace{\frac{p^2}{m^2c^2}}_{\varepsilon}}$$

$$\approx mc^2\left(1 + \frac{1}{2}\frac{p^2}{m^2c^2} - \frac{1}{8}\frac{p^4}{(m^2c^2)^2} + \dots\right)$$

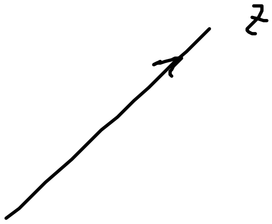
$$= mc^2 + \frac{1}{2m}p^2 - \frac{1}{8}\frac{p^4}{m^3c^2} + \dots$$



ÜA! Störungstheorie f. H-Atom

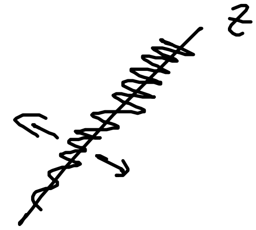
b) $H_B = -\frac{\hbar^2 q}{8m^2c^2\varepsilon_0}\rho_{Kern}(\vec{r})$

Schrödinger theorie



Wellenpaket

Dirac theorie



Geschwindigkeitskomponente in x, y -Richtg.

Schrödinger: Zitterbewegung tastet das Kernpotential ab

$$\phi_{Kern} = \phi_{Kern}(0) + \delta\vec{r}\cdot\vec{\nabla}\phi\big|_0 + \frac{1}{2}\left(\delta r\cdot\vec{\nabla}\right)^2\phi\big|_0$$

Zitterbewegg.

Mittlg. $\langle\phi\rangle = \phi(0) + \frac{1}{2}\left\langle\left(\delta\vec{r}\cdot\vec{\nabla}\right)^2\right\rangle\phi\big|_0$

2. Ableitg.

$\approx \lambda_c = \frac{\hbar}{mc}$

Abweichg. aufgrund der Compton-λ

$\widehat{=}$ Größenordng. Zitterbewegg.