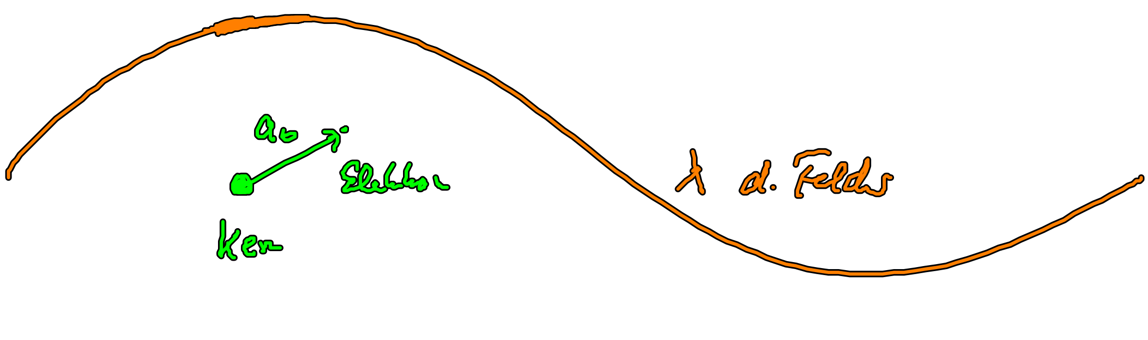
3.3. Eichtransformation der Potentiale

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

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' ändern $\to$ H' ändern

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

$$- \underbrace{q\,\hat{\vec{r}}}_{\text{Polarisierung (Dipol)}} \cdot \vec{E}(0,t)\; \underline{\hat{1}}$$

angeregter atomarer Dipol im optischen / statisch elektrischen Feld

$$\underbrace{- \frac{q}{2m} \vec{B}(0,t) \cdot \underbrace{\left(\hat{\vec{\ell}}\; \underline{\hat{1}} + g\, \hat{\vec{S}} \right)}_{\text{Magnetisierung}}}_{\text{paramagnetische WW}}$$

Kopplung d. externen magnet. Feld an Bahndrehimpuls + Spin

paramagnetische WW

Suszeptibilität: $\chi_m > 0$

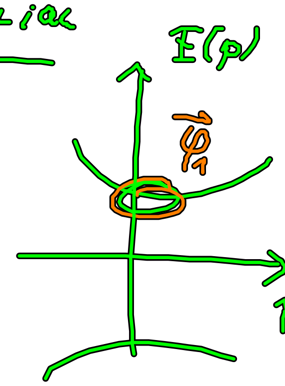
$$\underbrace{+ \frac{q}{2m} \vec{B}(0,t) \cdot \left(\frac{q}{4}\, \hat{\vec{r}} \times \left(\hat{\vec{r}} \times \vec{B}(0,t) \right) \right) \underline{\hat{1}}}_{\text{diamagnetische WW}}$$

diamagnetische WW

Suszeptibilität: $\chi_m < 0$

genaue Rechng. Übung

3.4. Höhere relativistische Korrekturen im Paulihamiltonian



einfachster Fall: Atom ohne externe Felder $\vec{A} = 0$

Kernpotential $\phi_{kern} \neq 0 \equiv \phi$

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

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

suche stationäre Lösungen:

$$\vec{\varphi}_i(\vec{r},t) \to \vec{\varphi}_i(\vec{r})\, e^{-iEt/\hbar}$$ einsetzen

$\downarrow$

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

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

$$E\vec{\varphi}_1 = \frac{c\,\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p}}{2mc^2} \Big(1 + \underbrace{\frac{E - q\phi(\vec{r})}{2mc^2}}_{}\Big)^{-1} c\,\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p}\, \vec{\varphi}_1 + q\phi \vec{\varphi}_1$$

$$\frac{\text{Energie}}{\text{Ruheenergie}} \ll 1$$

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

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

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

$\vec{\nabla}_r$

Nebenrechnung:

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

analog $\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\pi}\right)^2$ letzte VL

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

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

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

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

f. Kugelsymm. Problem

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

analog Lekt VL

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

(Lekt VL $(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{\pi}})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{\pi}})$)

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

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

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

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

Kernpotential

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

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

Spin-Bahn-Kopplg.
aus QM I

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

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

b) durch Näherung bei Taylorreihe ist (b)
leider nicht hermitisch → 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

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

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

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

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

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

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

Terme aufsammeln ergibt den relativistisch korrigierten Paulihamiltonian

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

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

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

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

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

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

Interpretation d. relativist. Korrekturen

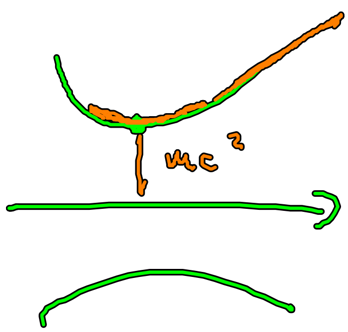
a) $H_a = -\dfrac{\vec{p}^{\,4}}{8m^3c^2}$

Korrektur zur Dispersion d. nichtrelativist. Teilchens.

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

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

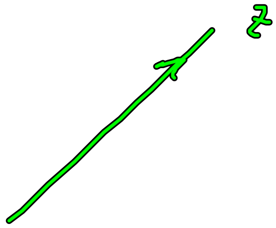
$$= mc^2 + \frac{1}{2m}p^2 - \frac{1}{8}\frac{p^4}{m^3c^2} + \dots$$



ÜA: Störungstheorie f. H-Atom

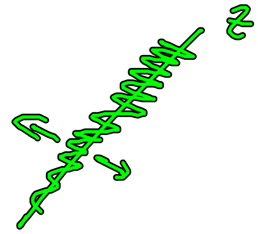
b) $H_B = -\dfrac{\hbar^2 q}{8m^2c^2\varepsilon_0}\,\rho_{Kern}(\vec{r})$

Schrödinger theorie



Wellenpakte

Dirac theorie



Geschwindigkeitskomponent in x, y -Richtg.

Schrödinger: Zitterbewegung tastet das Kernpotential ab

$$\phi_{Kern} = \phi_{Kern}(0) + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Zitterbewegg.}}}{\delta \vec{r}} \cdot \vec{\nabla} \phi \Big|_0 + \frac{1}{2} \left(\delta r \cdot \vec{\nabla} \right)^2 \phi \Big|_0$$

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

2 Ableitg.

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

Ableitg. aufgrund des Compton λ

$\hat{=}$ Größenordng. Zitterbewegg.