## 3. Nichtrelativistischer Grenzfall und erste relativistische Korrekturen zur Schrödingergleichung

a) um Auswirkungen auf die Atomphysik anzusehen benötigen wir Kernpotential $\phi_{Kern}$ (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

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

nach Prinzip der lokalen Eichinvarianz:

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

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

analog zu Hamiltonfunktion in klassischer Mechanik.

addiert die potentielle Energie

## Diracgleichg. mit Potentialen:

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

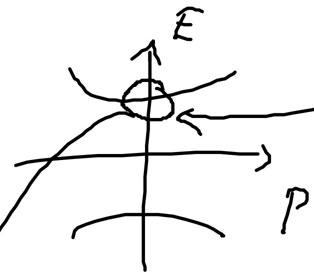
$\vec{\Pi} = \left( \vec{p} - q\vec{A} \right)$ verallgemeinerten Impuls einführen

## 3.1. Nichtrelativistische Näherungen (Idee)

Energiespektrum der Diracgl.

in einem Separationsansatz

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




Schrödinger welt

$E \sim p^2$

(de Broglie)

und positive Energien

angestrebt ist Taylorentwicklg. im ◯ - Bereich

müssen 2 Lsg. loswerden:

$$\vec\psi = \begin{pmatrix}\vec\varphi_1\\ \vec\varphi_2\end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix}\text{Teilchen}\\ \text{Antiteilchen}\end{pmatrix} \qquad \varphi_i : \text{Zweiervektor}$$

→ müssen wir loswerden

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix}\vec\varphi_1\\ \vec\varphi_2\end{pmatrix} = c\begin{pmatrix}\vec{\hat\sigma}\cdot\vec\Pi\,\vec\varphi_2\\ \vec{\hat\sigma}\cdot\vec\Pi\,\vec\varphi_1\end{pmatrix} + q\phi\begin{pmatrix}\vec\varphi_1\\ \varphi_2\end{pmatrix} + m_0c^2\begin{pmatrix}\vec\varphi_1\\ -\vec\varphi_2\end{pmatrix}$$

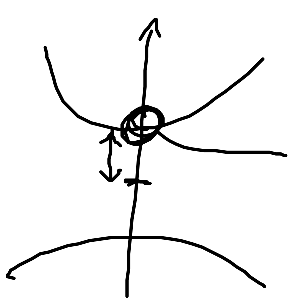
aus Struktur

$$\hat\alpha_i = \begin{pmatrix}0 & \hat\sigma_i\\ \hat\sigma_i & 0\end{pmatrix} \qquad \hat\beta = \begin{pmatrix}1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1\end{pmatrix}$$

Ansatz:

$$\begin{pmatrix}\vec\varphi_1\\ \vec\varphi_2\end{pmatrix} = \underline{\underline{e^{-i\frac{m_0c^2}{\hbar}t}}}\;\underline{\underline{\begin{pmatrix}\tilde{\vec\varphi}_1\\ \tilde{\vec\varphi}_2\end{pmatrix}}}$$

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





schnelle Zeitabhängigkeit

mit Fordg. $\partial_t \tilde{\vec\varphi}_{1/2} \ll \tilde{\vec\varphi}_{1/2}\dfrac{m_0c^2}{\hbar}$

die Forderung schränkt die Lösg. auf den Schrödingerbereich ein.

<u>Mittelzu:</u>

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

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

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

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

man macht jetzt Störungstheorie

$\vec{A}, \phi \qquad i\,\partial_t\,\varphi \ll \dfrac{2m_0c^2}{\hbar}\,\varphi$

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

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

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

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

Erinnert an Schrödinger:

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

folgende Vektoridentität nutzen:

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

<u>anwenden</u>:

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

$(\vec{p}-q\vec{A})^2$ analog zu Schrödingergleichung.

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

wirkt auf $\varphi_1$

Kreuzprodukt gleicher Vektoren $\to 0$

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

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

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

fällt mit uns weg

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

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

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

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

<u>bisher</u>:

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

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

$$= \underline{H}_{Pauli}\, \vec{\varphi}_1$$

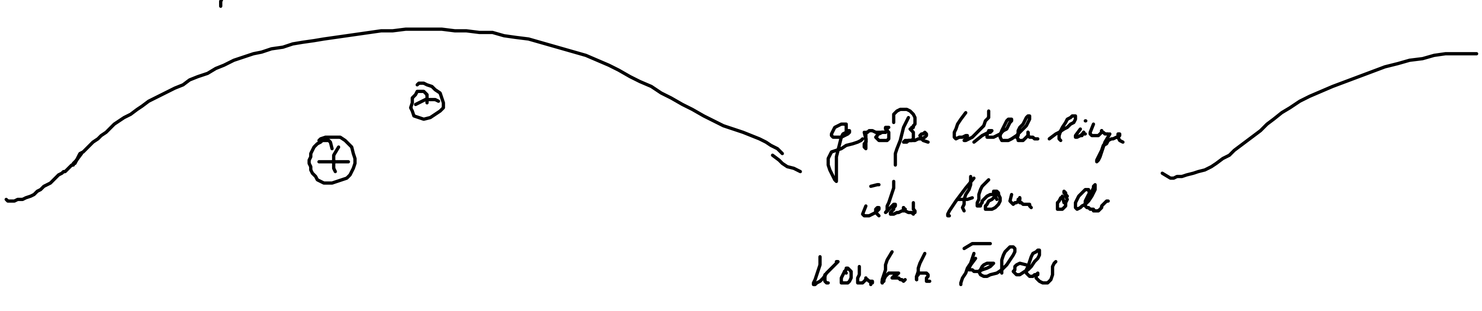
- Der erste Anteil ist analog d. herkömmliche QM, der zweite Anteil koppelt Spin und Magnetfeld und führt in d. Atomphysik zu neuen Effekten, z.B. Stern-Gerlach-Versuch.

- unschön: im 1. Teil Potentiale $A, \phi$, im 2. Teil Feld $B$

## 3.3. Eichtransformation der Potentiale

- $A, \phi$ 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 → unschön.

- es gibt eine Mgl. $\vec{A}\ \phi$ 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 ob jetzt in schwach veränderliche Felder $\vec{E}, \vec{B}$

stark — " — $\phi_{Kern}$

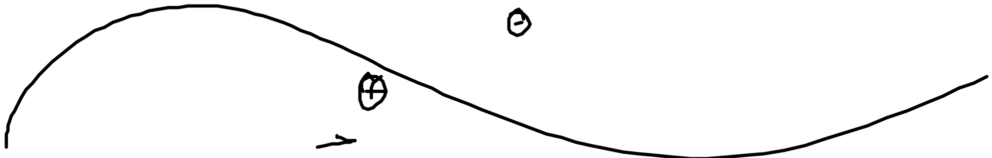
$$\phi, \vec{A} \longrightarrow \vec{E}, \vec{B} \Longrightarrow \text{wie ?}$$

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

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

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

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




$\chi$ : 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 ($\underline{H}_{atom}$)

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

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

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

extern 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 magnetische Moment (Klammer aus durch $\vec{B}$)

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

Magnetische Effekte, insbesondere Spin, ist in der Pauligleichung enthalten