

Fortsetzung: I.3. Nichtrelativistisches Grenzfall.

1802 Wollaston } fanden Spektrenlinien, Fraunhofer fand 570  
 1814 Fraunhofer } dunkle Linien

1888 Rydberg fand Formel  $\frac{1}{\lambda_{vac}} = R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$

1926 Schrödingers  $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$

Leider: 1922 in Frankfurt Stern und Gerlach

Doppelaufspaltung von Silberatommagneten in einem inhomogenen Magnetfeld nicht erklärbar durch Schrödingersgl., noch durch klassische Elektrodynamik, noch durch die Bohr-Sommerfeld Quantenregelung.

1926: Pauli spinmatrizen

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi = H \psi + \frac{q\hbar}{2m} (\underline{S} \cdot \underline{B}) \psi$$

1928: Dirac relativistische Verallg. des Schrödingersgl. und konnte die Pauli-gl. als relativistisches Grenzfall finden  
der Preis: Vorkonze einer Antiteilchen (Positron)

1932: Anderson experimentell die Existenz der Positrons

$$i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{\psi}_1 = \left( \frac{\hat{\pi}^2}{2m_0} + q\phi \right) \tilde{\psi}_1 + \underbrace{\frac{\hbar}{2m_0} \hat{G} \cdot (\hat{\pi} \times \hat{\pi})}_{\text{relativistische Korrektur}} \tilde{\psi}_1$$

$$\hat{\pi} = \hat{p} - \frac{q}{c} \underline{A}$$

Zum Koordinatensystem:

$$(\hat{\pi} \times \hat{\pi})_i \tilde{\psi}_1 = \left[ \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \underline{A} \right) \times \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \underline{A} \right) \right]_i \tilde{\psi}_1$$

beachte:  $\hat{p}$  wirkt auf die Komponenten von  $\tilde{\psi}_1$  und auch auf  $\underline{A}(\underline{r})$

$$= \underbrace{(\hat{p} \times \hat{p})_i}_{=0} \tilde{\varphi}_1 - \frac{q}{c} (\hat{p} \times \underline{A})_i \tilde{\varphi}_1 - \frac{q}{c} (\underline{A} \times \hat{p})_i \tilde{\varphi}_1 + \frac{q^2}{c^2} \underbrace{(\underline{A} \times \underline{A})_i}_{=0} \tilde{\varphi}_1 \quad (\text{da keine DED})$$

da  $\tilde{\varphi}_1$  zweimal stetig differenzierbar ist,  
tauschen partielle Ableitungen  
 $(p_2 p_3 - p_3 p_2) \tilde{\varphi}_1 = 0$

$$= \left[ -\frac{q}{c} (\underline{A} \times \hat{p})_i - \frac{q}{c} (\hat{p} \times \underline{A})_i \right] \tilde{\varphi}_1 \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{wähle ab jetzt die Ortsdarstellung} \\ \hat{p} = \underline{\Gamma}, \quad \hat{q} = \frac{\hbar}{i} \nabla \end{array} \right.$$

$$= \left[ -\frac{q}{c} \frac{\hbar}{i} \epsilon_{ijk} A_j \partial_k - \frac{q}{c} \epsilon_{ijk} \partial_j A_k \right] \tilde{\varphi}_1$$

$$= \epsilon_{ijk} \partial_k A_j - \epsilon_{ijk} \partial_j A_k \quad \left[ \begin{array}{l} \epsilon_{123} = 1, \quad \epsilon_{132} = -1, \\ \epsilon_{132} = -1, \quad \epsilon_{123} = -(-1) \end{array} \right]$$

$$= -\frac{q}{c} \frac{\hbar}{i} \epsilon_{ijk} [A_j \partial_k - \partial_k A_j] \tilde{\varphi}_1$$

umgekehrte Produktregel:  $\partial_k (A_j \tilde{\varphi}_1) = A_j (\partial_k \tilde{\varphi}_1) + (\partial_k A_j) \tilde{\varphi}_1$   
 $(\partial_k A_j) \tilde{\varphi}_1 = -A_j (\partial_k \tilde{\varphi}_1) + \partial_k (A_j \tilde{\varphi}_1)$

$$= \frac{q}{c} \frac{\hbar}{i} [\epsilon_{ijk} (\partial_k A_j)] \tilde{\varphi}_1 = -\frac{q}{c} \frac{\hbar}{i} [\epsilon_{ijk} (\partial_k A_j)] \tilde{\varphi}_1$$

klassische Elektrodynamik:  $\underline{B} = \nabla \times \underline{A}$ ,  $B_i = \epsilon_{ijk} \partial_j A_k$

$$\Rightarrow (\underline{\hat{\pi}} \times \underline{\hat{\pi}}) \tilde{\varphi}_1 = -\frac{q}{c} \frac{\hbar}{i} \underline{B}_i \tilde{\varphi}_1$$

einsetzen in die Gleichung für  $\tilde{\varphi}_1$

$$\pm \hbar \frac{d}{dt} \tilde{\varphi}_1 = \left( \frac{(\hat{p} - \frac{q}{c} \underline{A})^2}{2m_0} + q\phi \right) \tilde{\varphi}_1 - \frac{q}{c} \frac{\hbar}{i} \underline{\hat{G}} \cdot \underline{B} \tilde{\varphi}_1$$

Notationswechsel  $\tilde{\varphi}_1 = \varphi = \begin{pmatrix} \varphi_+ \\ \varphi_- \end{pmatrix}$

Pauli-Gleichung:  $\pm \hbar \frac{d}{dt} \varphi = \left[ \frac{1}{2m_0} (\hat{p} - \frac{q}{c} \underline{A})^2 + q\phi \right] \varphi - \frac{q}{c} \frac{\hbar}{i} \underline{\hat{G}} \cdot \underline{B} \varphi$

Definition des "Pauli-Hamiltonian"

$$\underline{\hat{H}}^{\text{Pauli}} = \left[ \frac{1}{2m_0} (\hat{p} - \frac{q}{c} \underline{A})^2 + q\phi \right] \varphi - \frac{q}{c} \frac{\hbar}{i} \underline{\hat{G}} \cdot \underline{B}$$

$$\pm \hbar \frac{d}{dt} \varphi = \underline{\hat{H}}^{\text{Pauli}} \varphi$$

zur weiteren Interpretation des Korrekturterms, erinnere an nicht-relativistische Quantenmechanik und dort an die Messung eines homogenen Magnetfeldes.

$$\underline{B} = \nabla \times \underline{A}, \quad \underline{A} = \frac{1}{2} \underline{B} \times \underline{r}$$

$$\Rightarrow \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \underline{A} \right)^2 = \hat{p}^2 + \frac{q^2}{c^2} \underline{A}^2 - \frac{q}{c} \hat{p} \cdot \underline{A} - \frac{q}{c} \underline{A} \cdot \hat{p}$$

es gilt:  $(\hat{p} \cdot \underline{A}) \underline{A} = (\hat{p} \cdot \underline{A}) \underline{A} + \underline{A} \cdot \hat{p} \underline{A}$   
 Null für den Fall  $\underline{A} = \frac{1}{2} \underline{B} \times \underline{r}$

$$= \hat{p}^2 + \frac{q^2}{c^2} \underline{A}^2 - 2 \frac{q}{c} \underline{A} \cdot \hat{p} = \hat{p}^2 + \frac{q^2}{c^2} \underline{A}^2 - \frac{q}{c} (\underline{B} \times \underline{r}) \cdot \hat{p} = \frac{1}{2} (\underline{r} \times \hat{p}) \cdot \underline{B} = \frac{1}{2} \underline{L} \cdot \underline{B}$$

$$= \hat{p}^2 + \frac{q^2}{c^2} \underline{A}^2 - \frac{q}{c} \underline{L} \cdot \underline{B}$$

Setze dies in die Pauli-Gleichung ein und vernachlässige den  $\underline{A}^2$ -Term. (diamagnetische Effekte)

wir definieren  $\underline{S} = \frac{\hbar}{2} \underline{\sigma}$  (Vektor der Paulimatrizen)

↑ zweikomponentige Analogie zum Dirac  $\psi$ -Spinor

$$\hat{H}_{\text{hom}}^{\text{Pauli}} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + q\phi - \frac{q}{2m_0c} (\underline{L} + 2\underline{S}) \cdot \underline{B} \quad \left| \quad -\frac{q\hbar}{2m_0c} = -\frac{q}{m_0c} \underline{S} \cdot \underline{B} \right.$$

man liest ab, Kopplung an  $\underline{B}$ -Feld analog zur elektrischen  $\underline{E}$   
 $-\underline{\mu} \cdot \underline{B}$  ( $\underline{\mu} \equiv$  Operator des magnetischen Moments)

$$\underline{\mu} = \underline{\mu}_{\text{Boltz}} + \underline{\mu}_{\text{spin}} = \frac{q}{2m_0c} (\underline{L} + 2\underline{S})$$

speziell zum Spin-Moment  $\underline{\mu}_{\text{spin}} = 2 \cdot \frac{q}{2m_0c} \underline{S} = g \frac{q}{2m_0c} \underline{S}$

mit  $g=2$  (Landé-Faktor)

speziell Elektron:  $q = -e$ ,  $\hat{H}_{\text{spin}} = -2 \frac{\mu_B}{\hbar}$  mit  $\mu_B = \frac{e_0 \hbar}{2m_0c}$  Boltz-Magneton

Anwendung aufs Wasserstoffatom:  $\hat{H}^H = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + q\phi(r) - \frac{q\phi(\underline{L})}{\hbar} = -\frac{e_0}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$

Eigenzustände von  $\hat{H}_{\text{hom}}^{\text{Pauli}}$  (mit homogenem Magnetfeld) können sofort aufgebaut werden:  $[\hat{H}^H, \hat{L}] = 0 = [\hat{H}^H, \hat{S}]$ ,  $\underline{B} = B \underline{e}_z$

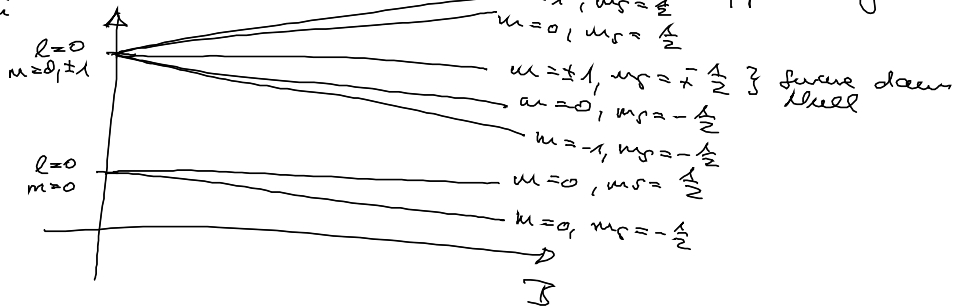
$\psi = \underbrace{\psi_{\text{kin}}(\underline{r})}_{\text{normale H-Atom Wellenfkt.}} \underbrace{\chi_{m_s}}_{\text{Spinfunktion}} \quad m_s = \pm \frac{1}{2}, \quad \chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

es gilt:  $\hat{L}_z \psi_{nlm} = \hbar m \psi_{nlm}$   $S_z \psi_{ms} = \hbar m_s \psi_{ms}$  (wobei  $\underline{B} = B \hat{e}_z$ )

$$\hat{H}_{\text{Pauli}} \psi = \left[ \underbrace{E_n}_{\text{Energieeigenwerte der Wasserstoffatome}} + \underbrace{\frac{\hbar \omega_0}{2m_0 c}}_{\text{Eigenwert von der z-Komponente des Bahndrehimpulses}} (\hbar m + 2 \hbar m_s) \right] \psi$$

Eigenwert von Spin

Einbeziehung des Spins führt zur zusätzlichen Aufspaltung der Niveaus



⇒ das Magnetfeld hebt also die Entartung teilweise auf

(b) Höhere relativistische Korrekturen (Spin-Bahn-WW)

In der Pauli- $\hat{H}$  Zylinder  $L$  und  $S$  unabhängig voneinander an das äußere Feld  $\underline{B}$ .

Wir wissen bspw., dass die D-Ferme von Dirac eine Fein-Struktur aufweist, also  $L$  und  $S$  beeinflussen sich gegenseitig!!

→ wir benötigen höhere Korrekturen

Auswahl: klassische Abschätzung der Spin-Bahn-WW

- betrachte Elektronen im Feld eines positiv geladenen Kerns
- Atomkern besitzt ein elektrostatisches Potential, aber kein Magnetfeld

⇒ Felder im Ruhesystem des Kerns  $\underline{E} = -\nabla \phi(r)$ ,  $\underline{B} = 0$

- berechne entsprechende Felder im Ruhesystem der Elektronen [spezielle Relativitätstheorie]

$$\underline{B}' = \gamma \left[ \underline{B} - \frac{1}{c} (\underline{v} \times \underline{E}) \right] - \frac{\gamma^2}{\gamma + 1} \underline{v} (\underline{v} \cdot \underline{B}) \quad , \quad \underline{E}' = \frac{\underline{v}}{c} \quad , \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

$$\underline{E}' = \gamma \left[ \underline{E} + c (\underline{v} \times \underline{B}) \right] - \frac{\gamma^2}{\gamma + 1} \underline{v} (\underline{v} \cdot \underline{E})$$

$\underline{B} = 0$ ,  $\gamma \approx 1$  (nicht-relativistischer Fall)

$$\underline{B}' = -\frac{1}{c^2} (\underline{v} \times \underline{E}) = \frac{1}{c^2} (\underline{E} \times \underline{v})$$

benutze noch  $\underline{E} = -\nabla\phi(\underline{r})$ ,  $\phi(\underline{r}) = \phi(r)$  (Zentralpotential)

$$\underline{E} = -\frac{\partial\phi}{\partial r} \frac{\underline{e}_r}{r} = -\frac{1}{r} \phi'(r) \underline{r}$$

$$\begin{aligned} \underline{B}' &= -\frac{1}{r} \phi'(r) \frac{1}{c^2} (\underline{r} \times \underline{v}) = -\frac{1}{r} \phi'(r) \frac{1}{c^2 m_0} (\underline{r} \times \underline{p}) = \\ &= -\frac{1}{r} \phi'(r) \frac{1}{c^2 m_0} \underline{L} \quad (\text{Bohr-Drehimpuls}) \end{aligned}$$

das externe Feld ist also linear mit Bohrdrehimpuls

benutze noch folgende Idee

$$-\frac{q}{2m_0 c} (2\underline{S} \cdot \underline{B}) \underset{\text{Elektron}}{\approx} -\frac{1}{\Gamma m_0} \phi'(r) \underbrace{\underline{S} \cdot \underline{L}}_{\text{Spin-Bahn-Kopplung}} !!$$

Beachte jedoch: das Ruhesystem des Elektrons ist  
bestimmunglos, also zwei Inertialsysteme, also  
zusätzliche Herleitung aus der Dirac-Gl. notwendig.

Benutze wieder Dirac-Theorie, spezialisiere auf den Fall des  
Zentralpotentials, aber  $\underline{A} = 0$

$$\rightarrow \hat{H}_D = c \hat{\alpha} \cdot \hat{p} + \hat{\beta} m_0 c^2 + q\phi$$

$$\text{Setze wieder } \underline{u} = \begin{pmatrix} \underline{\psi}_1 \\ \underline{\psi}_2 \end{pmatrix} = e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_1 \\ \tilde{\psi}_2 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_1 \\ \tilde{\psi}_2 \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \hat{\sigma} \cdot \hat{p} & \tilde{\psi}_2 \\ \hat{\sigma} \cdot \hat{p} & \tilde{\psi}_1 \end{pmatrix} + q\phi \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_1 \\ \tilde{\psi}_2 \end{pmatrix} - 2m_0 c^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{\psi}_2 \end{pmatrix}$$

noch exakt:

Beachte auch: bei der Herleitung der Pauli-Gl. haben wir  
 $i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{\psi}_2 = 0 = q\phi \tilde{\psi}_2$  gesetzt, weil dann  $-2m_0 c^2 \tilde{\psi}_2$

gilt: setze  $\tilde{\psi}_i(\underline{r}, t) = \psi_i(\underline{r}) e^{-iEt/\hbar}$  (Separationsansatz)

Ansatz, um stationäre Lösungen zu finden.

aber, die energieerhaltene Energie  $E$  ist nicht einfach

$$E - m_0 c^2 = \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2, \text{ da wir zwei freie Teilchen} \\ \text{muss betrachten.}$$

$$\rightarrow (1) E \underline{\psi}_1(\underline{r}) = c \underline{\hat{\sigma}} \cdot \underline{\hat{p}} \underline{\psi}_2 + q\phi \underline{\psi}_1(\underline{r})$$

$$(2) E \underline{\psi}_2(\underline{r}) = c \underline{\hat{\sigma}} \cdot \underline{\hat{p}} \underline{\psi}_1 + q\phi \underline{\psi}_2(\underline{r}) - 2m_0 c^2 \underline{\psi}_2(\underline{r})$$

$$(E - q\phi + 2m_0 c^2) \underline{\psi}_2(\underline{r}) = c \underline{\hat{\sigma}} \cdot \underline{\hat{p}} \underline{\psi}_1(\underline{r})$$

löse auf nach  $\underline{\psi}_2(\underline{r})$  und setze  $\underline{\psi}_2(\underline{r})$  in (1) ein

$$\Leftrightarrow E \underline{\psi}_1(\underline{r}) = \frac{c \underline{\hat{\sigma}} \cdot \underline{\hat{p}}}{2m_0 c^2} \frac{1}{\left(1 + \frac{E - q\phi(\underline{r})}{2m_0 c^2}\right)} c \underline{\hat{\sigma}} \cdot \underline{\hat{p}} \underline{\psi}_1(\underline{r}) + q\phi(\underline{r}) \underline{\psi}_1(\underline{r})$$