

I.3. Nichtrelativistischer Grenzfall

Motivation:

Genaues Verständnis der Kopplung von Atomen an elektromagnetische Felder
(Spektroskopie, Spin-Bahn-Wechselwirkung)

Es stellt sich heraus:

Wesentliche Phänomene können bereits im Rahmen einer Störperturbation für nichtrelativistische Effekte verstanden werden!

Ausgangspunkt

Dirac-Gleichung im elektromagnetischen Feld \Leftrightarrow in Anwesenheit der Potentiale

(Vektorpotential $\underline{A}(\underline{r}, t)$
Skalarpotential $\phi(\underline{r}, t)$)

Vorgehensweise wie bei der Klein-Gordon-Gleichung

$$\hat{\underline{p}} \rightarrow \hat{\underline{p}} - q \underline{A}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q \phi$$

$$(\Leftrightarrow H = H + q \phi)$$

q : Ladung

(für Elektronen: $q = -e$)

↑
Elementarladung

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[c \hat{\underline{\alpha}} \cdot (\hat{\underline{p}} - \frac{q}{c} \underline{A}) + \hat{\beta} m_0 c^2 + q \phi \hat{1} \right] \psi} \quad (*)$$

Dirac-Gl. im elektromagnetischen Feld

Definition:

$$\hat{\underline{\Pi}} = \hat{\underline{p}} - q \underline{A}$$

und benutzt wieder: $\hat{\alpha}^i = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}^i \\ \hat{\sigma}^i & 0 \end{pmatrix}$, $\hat{\beta} = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix}$

Ansatz für ψ : $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ wobei ψ_1, ψ_2 zweikomponentige Spaltenvektoren sind

Einsetzen in (*)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \hat{\sigma} \cdot \vec{\Pi} \psi_2 \\ \hat{\sigma} \cdot \vec{\Pi} \psi_1 \end{pmatrix} + q\phi \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} + m_0 c^2 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ -\psi_2 \end{pmatrix}$$

dabei ist $\hat{\sigma} \cdot \vec{\Pi} = \hat{\sigma}_1 \Pi_1 + \hat{\sigma}_2 \Pi_2 + \hat{\sigma}_3 \Pi_3$

Summe ist wieder $\hat{\sigma} \cdot \vec{p}$ (mit $\hat{\sigma}_i$)

Ziel: Verständnis des nichtrelativistischen Grenzfalls

Wir separieren dabei die Faktoren $e^{-i\frac{m_0 c^2}{\hbar} t}$ (Energie) von Dirac-Zustand ψ

Idee dahinter (Analog zum nicht-relativ. Grenzfall der Klein-Gordon-Gl.) (Erinnerung: $\psi \sim e^{-i\frac{E}{\hbar} t}$)

Im nichtrelativistischen Grenzfall ist

$$E' = E_{\pm} - m_0 c^2 = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2$$

↑
Klein-Teilchen

$$= m_0 c^2 \sqrt{\frac{p^2}{m_0^2 c^2} + 1} - m_0 c^2$$

$$\approx m_0 c^2 \left(1 + \frac{1}{2} \frac{p^2}{m_0^2 c^2} \right) - m_0 c^2 = \frac{p^2}{2m_0}$$

$$E' \ll m_0 c^2 \quad !!$$

Klass. kinetische Energie

Schreibe also:

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = e^{-i\frac{m_0 c^2}{\hbar} t} \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_1 \\ \tilde{\psi}_2 \end{pmatrix}$$

wobei $\begin{pmatrix} \tilde{\varphi}_1 \\ \tilde{\varphi}_2 \end{pmatrix}$ zeitlich veränderliche Laplace Variet
 $\underbrace{\sim}_{\sim e^{-i\frac{1}{\hbar}Et}}$ so dass $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\varphi}_i = E' \tilde{\varphi}_i \ll m_0 c^2 \tilde{\varphi}_i \quad !$
 $i=1,2$

Setze den Ansatz in $(**)$ und benutze Produktregel
 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\varphi}_i = e^{-i\frac{1}{\hbar}m_0c^2t} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\varphi}_i + m_0c^2 e^{-i\frac{1}{\hbar}m_0c^2t} \tilde{\varphi}_i$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \tilde{\varphi}_1 \\ \tilde{\varphi}_2 \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \hat{\sigma} \cdot \vec{\Pi} & \tilde{\varphi}_2 \\ \hat{\sigma} \cdot \vec{\Pi} & \tilde{\varphi}_1 \end{pmatrix} + q\phi \begin{pmatrix} \tilde{\varphi}_1 \\ \tilde{\varphi}_2 \end{pmatrix} - 2m_0c^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{\varphi}_2 \end{pmatrix} \quad (***)$$

a) Pauli-Gleichung

nicht-relativist. Grenzfall $(E' \ll m_0c^2)$

Relativenerie dominant! $\Rightarrow q\phi \tilde{\varphi}_2 \ll 2m_0c^2 \tilde{\varphi}_2$
 und $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\varphi}_2 \ll 2m_0c^2 \tilde{\varphi}_2$

Einfachste Näherung: Wir setzen diese Terme zu Null!!
 $q\phi \tilde{\varphi}_2 = 0, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\varphi}_2 = 0$

\Rightarrow Die (2-a) Gleichung für $\tilde{\varphi}_2$ wird zu

$$0 = c \hat{\sigma} \cdot \vec{\Pi} \tilde{\varphi}_1 - 2m_0c^2 \tilde{\varphi}_2$$

$$\Rightarrow \tilde{\varphi}_2 = \frac{\hat{\sigma} \cdot \vec{\Pi}}{2m_0c} \tilde{\varphi}_1 \quad (*)$$

Beachte noch: $\hat{\Pi} = \hat{p} - q/c \underline{A} \sim \text{Impuls} \sim \text{Grenzfallskalar}$

Die Gleichung (*) impliziert, dass der Spinor $\tilde{\varphi}_2$ um einen Faktor $\frac{v}{c}$ kleiner ist als $\tilde{\varphi}_1$

$\Rightarrow \tilde{\varphi}_1$ ist die "grosse" Komponente des vollen Spinors
 $\tilde{\varphi}_2$ " " "kleine" Komponente " " " "

Setze nun die Relation (*) in die Gleichung für $\tilde{\varphi}_1$, die sich aus (**) ergibt, ein

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{\varphi}_1 = \frac{(\underline{\sigma} \cdot \hat{\Pi})^2}{2m_0} \tilde{\varphi}_1 + q \phi \tilde{\varphi}_1$$

2x2 Einheitsmatrix

Wir haben effektiv nur noch eine Gleichung für den Zweikomponenten $\tilde{\varphi}_1$ (also für die "grosse" Komponente)

Noch zu berechnen:

$$(\underline{\sigma} \cdot \hat{\Pi})^2 \text{ mit } \hat{\Pi} = \hat{p} - q/c \underline{A}$$

Operator!

Man findet (hier ohne Beweis)

$$(\underline{\sigma} \cdot \hat{\Pi})^2 = \hat{\Pi}^2 \mathbb{1} + i \underline{\sigma} \cdot (\hat{\Pi} \times \hat{\Pi})$$

Das Produkt von zwei normalen Vektoren setzt Null, nicht das zwingend bei Operatoren!

$$\begin{aligned}
 \text{explizit: } i\hat{\underline{G}} \cdot (\hat{\underline{\Pi}} \times \hat{\underline{\Pi}}) &= i\hat{G}^1 (\hat{\Pi}_2 \hat{\Pi}_3 - \hat{\Pi}_3 \hat{\Pi}_2) \\
 &\quad - i\hat{G}^2 (\hat{\Pi}_3 \hat{\Pi}_1 - \hat{\Pi}_1 \hat{\Pi}_3) \\
 &\quad + i\hat{G}^3 (\hat{\Pi}_1 \hat{\Pi}_2 - \hat{\Pi}_2 \hat{\Pi}_1) \\
 &= i\hat{G}^1 [\hat{\Pi}_2, \hat{\Pi}_3] - i\hat{G}^2 [\hat{\Pi}_3, \hat{\Pi}_1] + i\hat{G}^3 [\hat{\Pi}_1, \hat{\Pi}_2] \\
 \hat{\underline{\Pi}}^2 &= \hat{\Pi}_1^2 + \hat{\Pi}_2^2 + \hat{\Pi}_3^2
 \end{aligned}$$

Einssetzen in dre \bar{e} (Zer) Gleichung für $\hat{\Psi}_1$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}_1 = \frac{1}{2m_0} \hat{\Pi}^2 \hat{\Psi}_1 + \frac{i}{2m_0} \hat{\underline{G}} \cdot (\hat{\underline{\Pi}} \times \hat{\underline{\Pi}}) \hat{\Psi}_1 + q\phi \hat{\Psi}_1$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}_1 = \left(\frac{\hat{\Pi}^2}{2m_0} + q\phi \right) \hat{\Psi}_1 + \frac{i}{2m_0} \hat{\underline{G}} \cdot (\hat{\underline{\Pi}} \times \hat{\underline{\Pi}}) \hat{\Psi}_1$$

Sieht schon aus wie in
der Schwäche Theorie ($\hat{\underline{\Pi}} = \hat{\underline{p}} - q\hat{\underline{A}}$),
Nur dass $\hat{\Psi}_1$ Zweikomponenten Vektor!

relativistische Korrekturen!

Zum Konkreten

$$\text{betrachte: } (\hat{\underline{\Pi}} \times \hat{\underline{\Pi}})_i \hat{\Psi} = [(\hat{\underline{p}} - q\hat{\underline{A}}) \times (\hat{\underline{p}} - q\hat{\underline{A}})]_i \hat{\Psi}$$

betrachte sowohl $\hat{\underline{p}}$ als auch $\hat{\underline{A}}$ hängt von \underline{r} ab
 $\Rightarrow \hat{\underline{p}}$ wirkt auf beide!

$$= (\hat{\underline{p}} \times \hat{\underline{p}})_i \hat{\Psi} - q_c (\hat{\underline{p}} \times \hat{\underline{A}})_i \hat{\Psi} - q_c (\hat{\underline{A}} \times \hat{\underline{p}})_i \hat{\Psi} + \frac{q_c^2}{c^2} (\hat{\underline{A}} \times \hat{\underline{A}})_i \hat{\Psi}$$

Null

da z.B. $(\hat{p}_1 \hat{p}_3 - \hat{p}_3 \hat{p}_1) \hat{\Psi}$
 $\rightarrow (\partial_2 \partial_3 - \partial_3 \partial_2) \hat{\Psi} = 0$
↳ Abschwächen (für $\hat{\Psi}$ stetig diff. ba)

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

$$\hat{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla$$

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

↑
Austauschregeln

$-\frac{q}{c} \epsilon_{ijk} \partial_k A_j$

über j, k
Wechsel summieren!

inverse Produktregel: $\partial_k (A_j \psi) = A_j \partial_k \psi + (\partial_k A_j) \psi$

$$= +\frac{q}{c} \frac{\hbar}{i} \epsilon_{ijk} A_j \partial_k \psi - \frac{q}{c} \epsilon_{ijk} \frac{\hbar}{i} (A_j \partial_k \psi + (\partial_k A_j) \psi)$$

$$= -\frac{q}{c} \frac{\hbar}{i} \epsilon_{ijk} (\partial_k A_j) \psi$$

benutze noch $\underline{B} = \nabla \times \underline{A}$ Magnetfeld

$$B_i = \epsilon_{ijk} \partial_j A_k$$

$$= \epsilon_{ikj} \partial_k A_j$$

$$\Rightarrow \left(\hat{\Pi} \times \hat{\Pi} \right)_i \psi = -\frac{q}{c} \frac{\hbar}{i} B_i \psi$$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{i}{2m_0} \hat{\underline{G}} \cdot (\hat{\underline{\Pi}} \times \hat{\underline{\Pi}})}_{\text{Gesamt relativistische}} \psi \rightarrow -\frac{q}{c} \frac{\hbar}{2m_0} \hat{\underline{G}} \cdot \underline{B} \psi$$

Korrekturen

Einsetzen in die Gleichung für $\hat{\underline{H}}$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\underline{\Psi}} = \left(\frac{(\hat{p} - \frac{q}{c} \underline{A})^2}{2m_0} + q\phi \right) \hat{\underline{\Psi}} - \frac{q}{c} \frac{\hbar}{2m_0} \hat{\underline{G}} \cdot \underline{B} \hat{\underline{\Psi}}$$

machte noch Notationswechsel

$$\vec{\psi} \rightarrow \varphi = \begin{pmatrix} \varphi_+ \\ \varphi_- \end{pmatrix}$$

„Pauli-Spinor“

Die beiden Komponenten sind für die beiden Einstellrichtungen des Spins

$$\Rightarrow \text{it} \frac{\partial}{\partial t} \varphi = \left(\frac{1}{2m_0} (\hat{p} - qc\hat{A})^2 + q\phi \right) \varphi - \frac{q\hbar}{2m_0 c} \vec{\sigma} \cdot \underline{B} \varphi$$

Pauli-Gl. (zwei-Komponentig)

Def. des „Pauli-Hamiltonian“

$$\hat{H}^{\text{Pauli}} = \frac{1}{2m_0} (\hat{p} - qc\hat{A})^2 + q\phi - \frac{q\hbar}{2m_0 c} \vec{\sigma} \cdot \underline{B} \quad 2 \times 2 \text{ Matrix}$$

(Vektor mit Pauli-Spinor-Matrizen)

enthält bereits die Ankopplung des Spins an das Magnetfeld!

Weitere Umstrukturierung, die den ersten Term in \hat{H}^{Pauli} mit dem Bohrschen Impuls \hat{p} verknüpft (genau wie in der nicht-relativist. QM!)

Für homogenes \underline{B} -Feld: $\underline{B} = \nabla \times \underline{A}$ ortsunabhängig

$$\Leftrightarrow \underline{A} = \frac{1}{2} \underline{B} \times \underline{r}$$

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

$$\text{es gilt: } (\hat{p} \cdot \underline{A} \varphi) = \underbrace{(\hat{p} \cdot \underline{A})}_{\text{Null mit } \otimes} \varphi + \underline{A} \cdot \hat{p} \varphi$$

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

$$\frac{1}{2} (\underline{B} \times \underline{r}) \cdot \hat{p} = \frac{1}{2} (\underline{r} \times \hat{p}) \cdot \underline{B}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} A^2 - \frac{q\hbar}{2m_0 c} \underline{\hat{L}} \cdot \underline{\hat{S}}$$

$$= \frac{1}{2} \underline{\hat{L}} \cdot \underline{\hat{S}}$$

↳ Bahndrehimpuls

Setze das in den Pauli-Hamiltonian ein und vernachlässige den Term $\sim A^2$ („diagonalisierbare Term“)

und definiere

$$\underline{\hat{S}} = \frac{\hbar}{2} \underline{\hat{\sigma}} \quad \text{Vektor mit den 3 Pauli-Spinmatrizen}$$

↳ Zwei-Komponenten Analogon zum vier-Komponenten Dirac-Spinor

$$\Rightarrow H^{\text{Pauli}} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + q\phi - \frac{q\hbar}{2m_0 c} (\underline{\hat{L}} + 2\underline{\hat{S}}) \cdot \underline{B}$$