I.3. Nichtrelativistischer Grenzfall

Motivation:

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

Es stellt sich heraus:

Wesentliche Phänomene können bereits im Rahmen einer Störungstheorie für relativistische Effekte verstanden werden!

Ausgangspunkt

Dirac-Gleichung im elektromagnetischen Feld $\Leftrightarrow$ in Anwesenheit der Potentiale $\underline{A}(\underline{r},t)$ (Vektorpotential), $\phi(\underline{r},t)$ (skalares Potential)

Vorgehensweise wie bei der Klein-Gordon-Gleichung

$$\hat{\underline{p}} \longrightarrow \hat{\underline{p}} - \frac{q}{c}\underline{A} \qquad q: \text{Ladung}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \longrightarrow \hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\phi \qquad (\text{für Elektron: } q = -e_0)$$

Elementarladung

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

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underline{\Psi} = \left[c\hat{\underline{\alpha}}\cdot\left(\hat{\underline{p}} - \frac{q}{c}\underline{A}\right) + \hat{\beta}m_0c^2 + q\phi\hat{1}\right]\underline{\Psi}} \quad (*)$$

Dirac-Gl. im elektromagnetischen Feld

definiere:

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

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

Ansatz für $\underline{\Psi}$: $\underline{\Psi} = \begin{pmatrix} \underline{\varphi}_1 \\ \underline{\varphi}_2 \end{pmatrix}$ wobei $\underline{\varphi}_1, \underline{\varphi}_2$ zweikomponentige Spaltenvektoren sind

Einsetzen in (*):

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \underline{\varphi}_1 \\ \underline{\varphi}_2 \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \underline{\hat{\sigma}} \cdot \underline{\hat{\Pi}}\, \underline{\varphi}_2 \\ \underline{\hat{\sigma}} \cdot \underline{\hat{\Pi}}\, \underline{\varphi}_1 \end{pmatrix} + q\phi \begin{pmatrix} \underline{\varphi}_1 \\ \underline{\varphi}_2 \end{pmatrix} + m_0 c^2 \begin{pmatrix} \underline{\varphi}_1 \\ -\underline{\varphi}_2 \end{pmatrix}} \quad (**)$$

dabei ist $\underline{\hat{\sigma}} \cdot \underline{\hat{\Pi}} = \hat{\sigma}^1 \hat{\Pi}_1 + \hat{\sigma}^2 \hat{\Pi}_2 + \hat{\sigma}^3 \hat{\Pi}_3$ Summe ist wieder 2x2 Matrix

Ziel: Verständnis des nichtrelativistischen Grenzfalls

Wir separieren dazu den Faktor $e^{-i/\hbar \underbrace{m_0 c^2}_{\text{Ruheenergie}} t}$ vom Dirac-Zustand ab

Idee dahinter (analog zum nicht-relativist. Grenzfall der Klein-Gordon-Gl.) (Erinnerung: $\underline{\varphi} \sim e^{-i/\hbar E t}$)

Im nichtrelativistischen Grenzfall ist

$$E' = E_+ - m_0 c^2 \underset{\text{freies Teilchen}}{=} \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2$$

$$= m_0 c^2 \sqrt{\underbrace{\frac{p^2}{m_0^2 c^2}}_{x \ll 1} + 1} - m_0 c^2$$

$$\approx m_0 c^2 \left(1 + \frac{1}{2}\frac{p^2}{m_0^2 c^2}\right) - m_0 c^2 = \frac{p^2}{2m_0} \quad \text{klass. kinetische Energie}$$

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

Schreibe also:

$$\begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = e^{-i/\hbar m_0 c^2 t} \begin{pmatrix} \underline{\tilde{\varphi}}_1 \\ \underline{\tilde{\varphi}}_2 \end{pmatrix}$$

wobei $\begin{pmatrix} \tilde{\varphi}_1 \\ \tilde{\varphi}_2 \end{pmatrix}$ zeitlich vergleichsweise langsam variiert

$\sim e^{-\frac{i}{\hbar}E't}$

so dass: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\tilde{\varphi}_i = E'\tilde{\varphi}_i \ll m_0 c^2 \tilde{\varphi}_i$!
$i=1,2$

Setze den Ansatz in (**) und benutze Produktregel

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\varphi_i = e^{-\frac{i}{\hbar}m_0c^2t}\, i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\varphi}_i + m_0c^2 e^{-\frac{i}{\hbar}m_0c^2t}\tilde{\varphi}_i$$

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

a) Pauli-Gleichung

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

Ruheenergie 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-te) Gleichung für $\tilde{\varphi}_2$ wird zu

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

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

Beachte noch: $\hat{\underline{\Pi}} = \hat{\underline{p}} - q/c\,\underline{A}$ ~ Impuls ~ Geschwindigkeit

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

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

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

$$\Longrightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\underline{\varphi}}_1 = \frac{(\hat{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{\Pi}})^2}{2m_0} \tilde{\underline{\varphi}}_1 + q\phi\, \underbrace{\mathbb{1}}_{2\times 2 \text{ Einheitsmatrix}}\, \tilde{\underline{\varphi}}_1}$$

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

Noch zu berechnen:

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

Operator!

Man findet (hier ohne Beweis)

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

Das Produkt wäre bei normalen Vektoren sofort Null, nicht aber zwingend bei Operatoren!

explizit: $i\hat{\underline{\sigma}}\cdot(\hat{\underline{\Pi}}\times\hat{\underline{\Pi}}) = i\hat{\sigma}^1(\hat{\Pi}_2\hat{\Pi}_3 - \hat{\Pi}_3\hat{\Pi}_2)$
$-i\hat{\sigma}^2(\hat{\Pi}_3\hat{\Pi}_1 - \hat{\Pi}_1\hat{\Pi}_3)$
$+i\hat{\sigma}^3(\hat{\Pi}_1\hat{\Pi}_2 - \hat{\Pi}_2\hat{\Pi}_1)$

$$= i\hat{\sigma}^1[\hat{\Pi}_2,\hat{\Pi}_3] - i\hat{\sigma}^2[\hat{\Pi}_3,\hat{\Pi}_1] + i\hat{\sigma}^3[\hat{\Pi}_1,\hat{\Pi}_2]$$

$$\hat{\underline{\Pi}}^2 = \hat{\Pi}_1^2 + \hat{\Pi}_2^2 + \hat{\Pi}_3^2$$

Einsetzen in die (2er) Gleichung für $\tilde{\underline{\varphi}}_1$:

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

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\underline{\varphi}}_1 = \underbrace{\left(\frac{\hat{\underline{\Pi}}^2}{2m_0} + q\phi\right)\hat{1}\,\tilde{\underline{\varphi}}_1}_{\text{sieht schon aus wie in der Schrödingertheorie } (\hat{\underline{\Pi}} = \hat{\underline{p}} - \frac{q}{c}\underline{A}),\ \text{nur dass } \tilde{\underline{\varphi}}_1 \text{ zweikomponentiger Vektor!}} + \underbrace{\frac{i}{2m_0}\hat{\underline{\sigma}}\cdot(\hat{\underline{\Pi}}\times\hat{\underline{\Pi}})\tilde{\underline{\varphi}}_1}_{\text{relativistische Korrektur!}}}$$

Zum Kreuzprodukt

betrachte: $(\hat{\underline{\Pi}}\times\hat{\underline{\Pi}})_i\,\underline{\varphi} = \left[(\hat{\underline{p}} - \frac{q}{c}\underline{A})\times(\hat{\underline{p}} - \frac{q}{c}\underline{A})\right]_i\underline{\varphi}$

beachte: sowohl $\underline{\varphi}$ als auch $\underline{A}$ hängen von $\underline{r}$ ab

$\Rightarrow \hat{\underline{p}}$ wirkt auf beide!

$$= \underbrace{\cancel{(\hat{\underline{p}}\times\hat{\underline{p}})_i\,\underline{\varphi}}}_{\text{Null}} - \frac{q}{c}(\hat{\underline{p}}\times\underline{A})_i\underline{\varphi} - \frac{q}{c}(\underline{A}\times\hat{\underline{p}})_i\underline{\varphi} + \cancel{\frac{q^2}{c^2}(\underline{A}\times\underline{A})_i\,\underline{\varphi}}$$

Null
da z.B. $(\hat{p}_2\hat{p}_3 - \hat{p}_3\hat{p}_2)\underline{\varphi}$
$\rightarrow (\partial_2\partial_3 - \partial_3\partial_2)\underline{\varphi} = 0$
Ortsdarstellung (für $\underline{\varphi}$ 2-mal stetig diff.bar)

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

$\hat{\underline{p}} \to \frac{\hbar}{i}\nabla$

$$= \left[-\frac{q}{c}\frac{\hbar}{i}\varepsilon_{ijk} A_j \partial_k \underbrace{- \frac{q}{c}\varepsilon_{ijk}\partial_j A_k}_{-\frac{q}{c}\varepsilon_{ikj}\partial_k A_j} \right] \underline{\varphi}$$

Ortsdarstellung

über j, k wird summiert!

inverse Produktregel: $\partial_k (A_j \underline{\varphi}) = A_j \partial_k \underline{\varphi} + (\partial_k A_j)\underline{\varphi}$

$$= + \frac{q}{c}\frac{\hbar}{i}\varepsilon_{ikj} A_j \partial_k \underline{\varphi} - \frac{q}{c}\varepsilon_{ikj}\frac{\hbar}{i}\left(A_j \partial_k \underline{\varphi} + (\partial_k A_j)\underline{\varphi}\right)$$

$$= - \frac{q}{c}\frac{\hbar}{i}\varepsilon_{ikj}(\partial_k A_j)\underline{\varphi}$$

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

$$B_i = \varepsilon_{ijk}\partial_j A_k = \varepsilon_{ikj}\partial_k A_j$$

$$\Rightarrow (\hat{\underline{\Pi}}\times\hat{\underline{\Pi}})_i \underline{\varphi} = -\frac{q}{c}\frac{\hbar}{i} B_i \underline{\varphi}$$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{i}{2m_0}\hat{\underline{\sigma}}\cdot(\hat{\underline{\Pi}}\times\hat{\underline{\Pi}})\underline{\varphi}}_{\text{Gesamte relativistische Korrekturterme}} \to -\frac{q}{c}\frac{\hbar}{2m_0}\hat{\underline{\sigma}}\cdot\underline{B}\,\underline{\varphi}$$

Einsetzen in die Gleichung für $\tilde{\underline{\varphi}}_1$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\underline{\varphi}}_1 = \left(\frac{(\hat{\underline{p}} - \frac{q}{c}\underline{A})^2}{2m_0} + q\phi\,\hat{1}\right)\tilde{\underline{\varphi}}_1 - \frac{q}{c}\frac{\hbar}{2m_0}\hat{\underline{\sigma}}\cdot\underline{B}\,\tilde{\underline{\varphi}}_1$$

mache noch Notationswechsel

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

„Pauli-Spinor"
Die beiden Komponenten stehen für die beiden Einstellrichtungen des Spins

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

Pauli-Gl. (zweikomponentig)

Def. des „Pauli-Hamiltonian"

$$\hat{H}^{Pauli} = \frac{1}{2m_0}\left(\hat{\underline{p}} - \frac{q}{c}\underline{A}\right)^2 + q\phi\,\hat{1} - \frac{q\hbar}{2m_0}\,\hat{\underline{\sigma}}\cdot\underline{B}$$

2×2 Matrix

(Vektor mit Pauli-Spin-Matrizen

enthält bereits die Ankopplung des Spins an das Magnetfeld!

Weitere Umschreibung, die den ersten Term in $\hat{H}^{Pauli}$ mit dem Bahndrehimpuls $\underline{L}$ verknüpft (genau wie in der nicht-relativist. QM!)

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

$$\Leftrightarrow \underline{A} \overset{(*)}{=} \frac{1}{2}\underline{B} \times \underline{r}$$

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

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

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

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

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

$= \frac{1}{2}\,\underline{L}\cdot\underline{B}$

Bahndrehimpuls

Setze das in den Pauli-Hamiltonian ein und vernachlässige den Term $\sim \underline{A}^2$ („diamagnetischer Term")

und definiere

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

Vektor mit den 3 Pauli-Spinmatrizen

zweikomponentiges Analogon zum vierkomponentigen Dirac-Spinoperator

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