

4. Nichtrelativistischer Grenzfall:

Schrödinger-Gleichung \equiv Wasserstoffspektrum

aber: Stern-Gerlach-Versuch (1922)

Zeigt inneren Freiheitsgrad von Atomen
in Bezug auf ein externes (hier inhomogenes)
Magnetfeld (\equiv Aufspaltung)

\Rightarrow Erklärungsbedarf führt zur Spintheorie

Dirac-Gleichung \equiv Fundierung des Spins
aus dem nichtrelativistischen
Grenzfall

Heute: Herleitung der Pauli-Gleichung
aus der Dirac-Gleichung
 $\hat{=}$ Schrödinger-Gl. mit Spin

- Kopplung von Atomen an elektromagnetische
Felder, um Spektroskopie zu verstehen, dabei
Dirac-Gl. zugrunde zu legen, aber auch dem
Problem anzupassen; denn wesentliche
Effekte sind bereits in der Störungstheorie
enthalten.

$\hat{=}$ Ableitung von Termen wie Spin-Bahn-Gl.
aus der Dirac-Gl.

Einführung des Feldes durch die Potentiale

$$\underline{A}, \phi \quad \vec{p} \rightarrow \vec{p} - q\vec{A}, \quad H \rightarrow H + q\phi$$

Dirac-Gl. lautet nun:

$$i\hbar \partial_t \vec{\psi} = (c\hat{\alpha} (\vec{p} - q\vec{A}) + \beta mc^2 + q\phi) \vec{\psi}$$

$\vec{\beta}, \hat{\alpha} \equiv$ Vektor v. Matrizen

\vec{A}, ϕ : angelegte Felder von außen
 bzw. abstrakte Felder des Elektrons

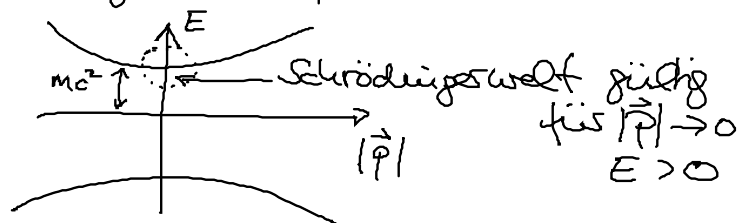
simultane Definition des kanonischen Impulses

$$\vec{\pi} \equiv \vec{p} - q\vec{A}$$

4.1: Näherungsparameter

Herleitung eines „verbesserten“ Schrödingeragl. aus der Dirac-Theorie

Zweig der Energie-Dispersion



$$\vec{\psi} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

↑ Teilchenartig ↓ Antiteilchenartig

$$i\hbar \partial_t \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} & \psi_2 \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} & \psi_1 \end{pmatrix} + q\phi \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

Idee: Um in die Schrödingerwelt zu kommen, verschieben wir den Spinor um die Ruheenergie

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

Forderung: $\partial_t \tilde{\psi}_i \ll \frac{mc^2}{\hbar} \tilde{\psi}_i$ (langsam veränderliche) slowly varying envelope approx. SVEA

einsetzen

$$i\hbar \partial_t \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_1 \\ \tilde{\psi}_2 \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} & \tilde{\psi}_2 \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} & \tilde{\psi}_1 \end{pmatrix} + q\phi \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_1 \\ \tilde{\psi}_2 \end{pmatrix} - 2mc^2 \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_1 \\ \tilde{\psi}_2 \end{pmatrix}$$

Sves: $\vec{\psi} \rightarrow \vec{\phi}$ (Komponentenweise) Antiteilchen

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

$$i\hbar \partial_t \vec{\phi}_2 = c \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \vec{\phi}_1 + q\phi \vec{\phi}_2 - 2mc^2 \vec{\phi}_2$$

4.2: Herleitung der Pauli-Gl. ohne Spin-Bahn-Korr.

einfachste Näherung $q\phi \vec{\phi}_2, \vec{\phi}_2 \ll mc^2 \vec{\phi}_2$

$$\vec{\phi}_2 = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}}{2mc} \vec{\phi}_1$$

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

sieht ähnlich aus wie Schrödinger-Gl.
aber $(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2$ muss explizit ausgerechnet werden

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{\equiv \sigma_x} \pi_1 + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}}_{\equiv \sigma_y} \pi_2 + \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_{\equiv \sigma_z} \pi_3$$

\uparrow
 $\pi_x - qA_x$

$$= \begin{pmatrix} \pi_3 & \pi_1 - i\pi_2 \\ \pi_1 + i\pi_2 & -\pi_3 \end{pmatrix}$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2 = \begin{pmatrix} \pi_3 & \pi_1 - i\pi_2 \\ \pi_1 + i\pi_2 & -\pi_3 \end{pmatrix}^2 \quad \text{Ausmultiplizieren}$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2 \vec{\phi}_1 = (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2 \vec{\phi}_1(\vec{r}, t)$$

Reihenfolge beachten !!

$$= (\dots) \vec{\phi}_1$$

$$\begin{aligned}
(\hat{p}^2) &= \begin{pmatrix} \pi_3^2 + \pi_1^2 + \pi_2^2 + i(\pi_1\pi_2 - \pi_2\pi_1) & (\pi_3\pi_1 - \pi_1\pi_3) - i(\pi_2\pi_2 - \pi_2\pi_3) \\ \pi_1\pi_3 - \pi_3\pi_1 + i(\pi_2\pi_3 - \pi_3\pi_2) & (\pi_1^2 + \pi_2^2 + \pi_3^2) - i(\pi_1\pi_2 - \pi_2\pi_1) \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \vec{\pi}^2 & 0 \\ 0 & \vec{\pi}^2 \end{pmatrix} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & [\pi_3, \pi_1] \\ -[\pi_3, \pi_1] & 0 \end{pmatrix}}_{\hat{\sigma}_y} + \\
&\quad + i \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -[\pi_3, \pi_2] \\ -[\pi_3, \pi_2] & 0 \end{pmatrix}}_{\hat{\sigma}_x} + i \underbrace{\begin{pmatrix} [\pi_1, \pi_2] & 0 \\ 0 & -[\pi_1, \pi_2] \end{pmatrix}}_{\hat{\sigma}_z} \\
&= \begin{pmatrix} \vec{\pi}^2 & 0 \\ 0 & \vec{\pi}^2 \end{pmatrix} + i \hat{\sigma}_y [\pi_3, \pi_1] - i \hat{\sigma}_x [\pi_3, \pi_2] \\
&\quad + i \hat{\sigma}_z [\pi_1, \pi_2]
\end{aligned}$$

$$\begin{vmatrix} \hat{\sigma}_x & \hat{\sigma}_y & \hat{\sigma}_z \\ \pi_1 & \pi_2 & \pi_3 \\ \pi_1 & \pi_2 & \pi_3 \end{vmatrix} = \dots$$

$$\begin{aligned}
&= \begin{pmatrix} \vec{\pi}^2 & 0 \\ 0 & \vec{\pi}^2 \end{pmatrix} + i (\vec{\pi} \times \vec{\pi}) \cdot \vec{\sigma} \\
(\hat{p}^2) \vec{\varphi}_1 &= \left[\begin{pmatrix} \vec{\pi}^2 & 0 \\ 0 & \vec{\pi}^2 \end{pmatrix} + i (\vec{\pi} \times \vec{\pi}) \cdot \vec{\sigma} \right] \vec{\varphi}_1
\end{aligned}$$

$$\underline{\underline{i\hbar \partial_t \vec{\varphi}_1 = \frac{M}{2m} \vec{\pi}^2 \vec{\varphi}_1 + \frac{1}{2m} i \vec{\sigma} \cdot (\vec{\pi} \times \vec{\pi}) \vec{\varphi}_1 + q\phi M \vec{\varphi}_1}} \quad \left(M = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right)$$

..... \equiv Schrödinger-Gl.

 \equiv relativistische Korrektur

$$\begin{aligned}
& [\vec{\pi} \times \vec{\pi}]^i \psi_1(\vec{r}, t) = \\
& = [(\vec{p} - q\vec{A}) \times (\vec{p} - q\vec{A})]^i \psi_1(\vec{r}, t) \\
& = [-q\vec{A} \times \vec{p} - q\vec{p} \times \vec{A}]^i \psi_1(\vec{r}, t) \quad \left| \begin{array}{l} (\vec{A} \times \vec{A}) = 0 \\ (\vec{p} \times \vec{p}) = 0 \end{array} \right. \\
& = -\frac{qt}{\hbar} \left(\epsilon^{ijk} A_j \partial_k + \epsilon^{ikj} \partial_k A_j \right) \psi_1 \quad \left| \begin{array}{l} \text{Summieren } j, k \\ \text{werden} \end{array} \right. \\
& = -q \frac{t}{\hbar} \epsilon^{ijk} \underbrace{(A_j \partial_k - \partial_k A_j)}_{(\partial_k A_j) \psi_1 + A_j \partial_k \psi_1} \psi_1 \\
& = -q \frac{t}{\hbar} \epsilon^{ijk} (-\partial_k A_j) \psi_1 \quad (\vec{B} = \nabla \times \vec{A}) \\
& = -\frac{qt}{\hbar} \epsilon^{ikj} (\partial_k A_j) \psi_1 = -\frac{qt}{\hbar} B^i \psi_1
\end{aligned}$$

damit ergibt sich die Pauli-Gl. als relativistische Korrektur

$$\begin{aligned}
i\hbar \partial_t \psi_1 &= \left(\frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + q\phi \right) \psi_1 \\
&\quad - \frac{qt}{2m} (\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) \psi_1 = \hat{H}_{\text{Pauli}} \psi_1 \\
&\quad \left(\begin{array}{l} \psi_+ \\ \psi_- \end{array} \right)
\end{aligned}$$

$\frac{q}{2m} \rightarrow$ Zeeman-Magnetton

4.3.: Umwidmung der Lagrange-Funktion: Übungszettel 3

4.4. Bsp. für die Anwendung
Zeeman-Effekt in starken Magnetfeldern

(weitere Korrekturen: Darwin-Terme
Spin-Bahn-Kopplung)

$\vec{e}_1 = \langle n | a (\vec{r}) \chi_{m_s} \rangle$ Spinfreiheitsgrad
 Ansatz \leftarrow Lösung vom Wasserstoffproblem

$\chi_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{B} = B_z \vec{e}_z$

$H = \left(\frac{\hbar^2 \vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \mathbb{1} + \frac{e}{2m} \left(\underbrace{L_z}_{\text{Orbitallmoment}} \mathbb{1} + \underbrace{2S_z}_{\frac{\hbar}{2} G_z} \right) \mathbb{1}$

$H \langle n | m_l m_s \rangle = \left(E + \frac{B_z \hbar}{2m} (m_l + 2m_s) \right) \langle n | m_l m_s \rangle$
 Wasserstoff-Energie \quad \nearrow \quad dynamische Faktor
 Energie der Wasserstoffatom im Magnetfeld

