14. Schrödinger-Gl. des Elektrons im elektromagnetischen Feld

magnetische Momente, Zeeman-Aufspaltung, L-S-Kopplung

14.1. Ankopplung

klass. Mechanik
$$m\ddot{\vec{x}}(t) = e\left\{\vec{E}(\vec{x},t) + \frac{1}{c}\left[\dot{\vec{x}}\times\vec{B}(\vec{x},t)\right]\right\}$$

Lorentzkraft

$$\left.\begin{aligned}\vec{E} &= -\vec{\nabla}\phi - \frac{1}{c}\partial_t\vec{A}\\ \vec{B} &= \vec{\nabla}\times\vec{A}\end{aligned}\right\} \rightarrow \frac{d}{dt}\left(m\dot{\vec{x}} + \frac{e}{c}\vec{A}\right) = -e\vec{\nabla}\left(\phi - \dot{\vec{x}}\cdot\vec{A}\right) \quad (*)$$

tot. Abl.!

$$\mathcal{L} = \left(\frac{m}{2}\dot{\vec{x}}^2 + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x},t)\cdot\dot{\vec{x}}(t)\right) - e\phi \,; \qquad \frac{d}{dt}\underbrace{\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{x}_i}}_{p_i} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x_i}$$

p_i kanonischer Impuls

$$H(x_i,p_i) = \sum_i p_i\dot{x}_i - \mathcal{L}(\vec{x},\dot{\vec{x}},t)$$

$$= \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + e\phi$$

$$\Downarrow$$

QM
$$\boxed{H_{op} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + e\phi(\vec{x},t)}$$

"minimale Ankopplung"

in $\quad i\partial_t\psi(\vec{x},t) = H_{op}\psi(\vec{x},t)$

ist eichinvariant? $\qquad \vec{A}\rightarrow\vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda(\vec{x})$

$$! \quad H_{op}\rightarrow\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A} - \frac{e}{c}\vec{\nabla}\Lambda\right)^2 + e\phi = H_{op_\Lambda}$$

$(*)$ $\quad \dot{\vec{x}}\times(\vec{\nabla}\times\vec{A}) = \vec{\nabla}(\dot{\vec{x}}\cdot\vec{A}) - (\dot{\vec{x}}\cdot\vec{\nabla})\vec{A} \,; \quad \left((\vec{\nabla})(\vec{x})\right)^{\cdot} = \underline{1} = 0$

~~aber~~
in neuer Schrödinger Gl. mit $\psi_\Lambda(\vec x,t) = \underbrace{e^{ie/\hbar c\,\Lambda(\vec x)}}_{U_\Lambda}\psi(\vec x,t)$ $\quad U_\Lambda$ unitär

$$i\partial_t\psi_\Lambda(\vec x,t) = H_\Lambda\psi_\Lambda(\vec x,t) \;:\quad \overbrace{U_\Lambda H U_\Lambda^+}^{H_\Lambda} U_\Lambda \psi = E\, U_\Lambda\psi, \qquad \underbrace{U_\Lambda^+ U_\Lambda}_{1}$$

U_Λ ist ein $\vec x$-abhängiger Phasenfaktor von ψ; $|\psi|^2$ invariant

weiterer Kopplungsterm aus Dirac-Gl. (104'.. relativistische Eff.)

$$-\underbrace{\vec\mu_s}_{\text{magnetisches Moment}}\cdot\vec B \quad \text{mit} \quad \vec\mu_s = 2\,\underbrace{\frac{e}{2mc}}\,\frac{\hbar\vec\sigma}{2}$$

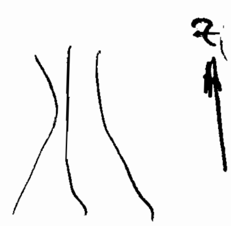
2: gyromagnetischer Faktor (⇝ Landé-Faktor Spin)

$\frac{e}{2mc}$: Bohrsches Magneton (s.u.) $\mu_B/\hbar$

$\frac{\hbar\vec\sigma}{2}$: Spin $\vec S$!

(experimentell: 5s Elektron (Silberatome) mit $l=0$ zeigt im Stern-Gerlach Versuch (1922) Aufspaltung im inhomogenen Magnetfeld

$$\vec F = \vec\nabla(\vec\mu\cdot\vec B) \sim \mu_z\frac{\partial B_z}{\partial z}\vec e_z$$



14.3 Betrachte nun: konstantes Magnetfeld in 3-Richtung

$$H_{op} = \frac{1}{2m}\vec p^{\,2} - \frac{e}{2mc}\big(\underbrace{\vec p\cdot\vec A + \vec A\cdot\vec p}_{2\frac{\hbar}{i}\vec A\cdot\vec\nabla}\big) + \frac{e^2}{2mc^2}\vec A^2 + e\Phi$$

für Coulombeichung $\vec\nabla\cdot\vec A = 0$

H ist also nicht für sich invariant

<u>aber</u>: wenn simultane Transformation

$$\psi \to \psi_\Lambda(\vec{x},t) = \underbrace{e^{(ie/\hbar c)\Lambda(\vec{x})}}_{U_\Lambda \,:\, \text{unitärer Phasenfaktor}} \psi(\vec{x},t)$$

gilt

$$i\partial_t \underbrace{\psi_\Lambda(\vec{x},t)}_{U_\Lambda \psi} = \underbrace{H_\Lambda}_{U_\Lambda H U_\Lambda^+} \underbrace{\psi_\Lambda(\vec{x},t)}_{U_\Lambda \psi}$$

---

daraus <u>wichtige</u> Bemerkung: die Schrödingergl. ist unter

$\psi(\vec{x},t) \to \psi_\alpha(\vec{x},t) = e^{i\alpha}\psi(\vec{x},t)$ invariant

("globale U(1)-Symmetrie") konst.!

→ Symm. + Erhaltungssatz für Schrödinger-Gl. **14.2**

<u>dazu</u>: Lagrange Formulierung

$$S = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int d^3x\, \mathcal{L}\big(\psi(\vec{x},t), \vec{\nabla}\psi(\vec{x},t), \dot{\psi}(\vec{x},t),$$
$$\psi^*(\vec{x},t), \vec{\nabla}\psi^*(\vec{x},t), \dot{\psi}^*(\vec{x},t)\big)$$

ψ komplex $= \psi_1 + i\psi_2$, betrachte ψ, ψ^* als unabhängige Variable

<u>Variation</u>

$$\psi \to \psi + \epsilon_1 \xi(\vec{x},t)$$
$$\psi^* \to \psi^* + \epsilon_2 \underbrace{\xi^*(\vec{x},t)}_{\text{Variation}}$$

$\left(\begin{array}{l} \xi(\vec{x},\pm\infty) = 0 \\ \xi(\vec{x}) \to 0 \text{ für } |\vec{x}| \to \infty \end{array}\right)$

$\vec{\nabla}\psi \to \vec{\nabla}\psi + \epsilon_1 \vec{\nabla}\xi$, $\quad \dot{\psi} \to \dot{\psi} + \epsilon_1 \dot{\xi}$

$\vec{\nabla}\psi^* \to \vec{\nabla}\psi^* + \epsilon_2 \vec{\nabla}\xi^*$, $\quad \dot{\psi}^* \to \dot{\psi}^* + \epsilon_2 \dot{\xi}^*$

$$0 = \delta S = \epsilon_1 \int dt \int d^3x \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi}\,\xi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec\nabla\psi}\cdot\vec\nabla\xi + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot\psi}\,\dot\xi\right) \quad (10)$$

$$+\ \epsilon_2 \times \text{c.c.} \qquad (*)$$

partielle Int.

$$= \epsilon_1 \int dt \int d^3x \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \vec\nabla\cdot\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec\nabla\psi} - \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot\psi}\right)\xi(\vec x,t)$$

$$+\ \epsilon_2 \times \text{c.c.}$$

"$\forall\ \xi, \epsilon_{1,2}$"

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} - \vec\nabla\cdot\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec\nabla\psi^*} - \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot\psi^*} = 0}$$

und c.c. Gleichung

$$\boxed{\mathcal{L}_{\text{Schrödinger}} = i\hbar\,(\psi^*\dot\psi - \dot\psi^*\psi)/2 - \hbar^2(\vec\nabla\psi^*)(\vec\nabla\psi)/2m - V(\vec x)\,\psi^*\psi}$$

(auch unsymm. $\psi^*\dot\psi$)

nachprüfen!

Invariant der Schrödinger Gl. unter $\psi \to e^{i\alpha}\psi$

infin. $\psi \to \psi + i\epsilon\psi$

$\psi^* \to \psi^* - i\epsilon\psi^*$

wähle oben $\epsilon_1 = \epsilon_2$, $\xi = i\psi$ und schreibe $\delta\mathcal{L} = 0$ mit Ausdruck (*) (unter dem Integral).

$$\to \underbrace{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi}\psi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec\nabla\psi}\cdot\vec\nabla\psi + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot\psi}\dot\psi}_{i\hbar(-\dot\psi^*\psi + \psi^*\dot\psi)/2} \underbrace{- \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*}\psi^* - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec\nabla\psi^*}\vec\nabla\psi^* - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot\psi^*}\dot\psi^*}_{-i\hbar(\dot\psi\psi^* - \psi\dot\psi^*)/2} = 0$$

ist Identität ✓ (trivialerweise)

benutze Lagrange-Gl., hier Schrödinger Gl. (104''

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} = \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} + \vec{\nabla}\cdot\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla}\psi}$$

$$\to \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}}\psi\right) + \vec{\nabla}\cdot\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla}\psi}\psi\right)$$

$$-\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*}\psi^*\right) - \vec{\nabla}\cdot\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla}\psi^*}\psi^*\right) = 0$$

hier

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(+i\hbar\frac{\psi^*\psi}{2} + i\hbar\frac{\psi^*\psi}{2}\right) + \frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\cdot\left(\vec{\nabla}\psi^*\psi - \vec{\nabla}\psi\psi^*\right)$$

$= 0$

Kontinuitätsgleichung!

siehe ~~Anf. der Vorlesung~~

$\vec{x}$-abhängige α's $\Longrightarrow$ "Eichtransformation"

erzwingt Einführung eines Eichfeldes $\vec{A}$!

brauche dann kinetischen Term für $\vec{A}$ in $\mathcal{L}(\vec{A},\ldots)$

$$\mathcal{L}_{\text{Maxwell}} = -\frac{1}{4}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu}$$

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu \ \ldots \ !$$

Übung

$\to$ Aharonov-Bohm-Effekt

(weiter 14.3 ! S.104)

wähle

$$\underbrace{\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{x}\times\vec{B}}$$

(„allgem. Koordinaten-Eichung" Fock-Schwinger-Eichung)

(durch $\vec{\nabla}\times\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{\nabla}\times(\vec{x}\times\vec{B}) = -\frac{1}{2}\vec{x}\,\vec{\nabla}\cdot\vec{B} + \frac{1}{2}\vec{B}\,\underbrace{\vec{\nabla}\cdot\vec{x}}_{3}$ $= \left(-\frac{1}{2}+\frac{3}{2}\right)\vec{B}$)

gravsmen

$$\frac{ie\hbar}{mc}\vec{A}\cdot\vec{\nabla} = -\frac{ie\hbar}{2mc}\underbrace{(\vec{x}\times\vec{B})\cdot\vec{\nabla}}_{-(\vec{x}\times\vec{\nabla})\cdot\vec{B}} = -\frac{e}{2mc}\,\vec{L}\cdot\vec{B} = -\vec{\mu}_L\cdot\vec{B}$$

↑ konstant!

$$\vec{\mu}_L = \frac{e}{2mc}\vec{L} \qquad \left(\vec{\mu} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{B}}\right)$$

Bohrsches Magneton $\mu_B/\hbar$

$\vec{B}$ sei in 3-Richtung: $-\mu_{L_3}\cdot B_3 = -\frac{e}{2mc}L_3 B_3$

$$-\mu_{S_3} B_3 = -\frac{2e}{2mc}\underbrace{S_3}_{\frac{\hbar\sigma_3}{2}} B_3$$

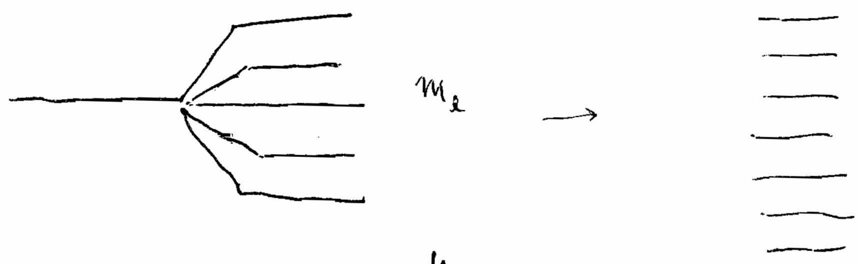
Der neue Hamilton-Operator wirkt im Raum der Spinoren $\begin{pmatrix}\psi_+(\vec{x},t)\\ \psi_-(\vec{x},t)\end{pmatrix}$, hat die gleichen simultanen Eigenfunktionen zu H, L^2, L_3, S^2, S_3 wie der alte H.O.

$$\Rightarrow \boxed{\Delta E = -\frac{e\hbar}{2mc}B_3\,(m_l + 2m_s)} \quad \pm\frac{1}{2}$$

daher: „magnetische Quantenzahlen"

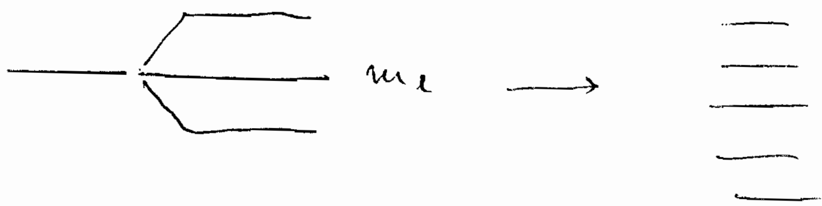
$\psi_\pm$: Eigenzustände zu S_3 mit E.W. $\hbar m_s$

$l=2$



äquidistante Aufspaltung (berechnen!)

$l=1$



Larmor-Frequenz

$$\omega_L = \frac{-eB}{2mc}$$

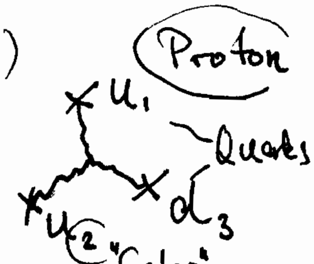
"normaler" Zeeman-Effekt

(ungerade Anzahl von Niveaus!)

Der "anomale" Zeeman Effekt ist normal! (siehe später)

Bem. bei Proton, Neutron keine minimale Ankopplung

$$\mu_{\text{Proton}} = \frac{e\hbar}{2M_p c}\cdot 2.793 \quad \left(\times\, 2\,\frac{S_3}{\hbar}\right)$$



$$\mu_{\text{Neutron}} = \;\dots\quad (-1.913)$$

sind keine fundamentalen Teilchen ⇝ Quarks als Komponenten

Elektron, Myon, Tau sind nach heutigem Verständnis fundamentale Teilchen

Bem. $\vec{A}^2$-Term für sehr große Magnetfelder

$$\rightarrow \frac{e^2}{8mc^2}\left(\vec{x}\times\vec{B}\right)^2 = \frac{e^2}{8mc^2}\left(\vec{x}^2\vec{B}^2 - (\vec{x}\cdot\vec{B})^2\right)$$

$$\underset{=}{B_3} \quad \frac{e^2 B_3^2}{8mc^2}\left(x_1^2+x_2^2\right)$$

magnetisches Moment $-\frac{\partial H_{an.}}{\partial B}$ gibt obigen (paramagnetischen) Ausdruck und den diamagnetischen $\langle m\rangle = -\frac{e^2 B_3}{4mc^2}\langle x_1^2+x_2^2\rangle$

$$\simeq -\frac{e^2 B_3}{6mc^2}\underset{\text{Bohr-Radius}}{a^2}$$

14.3 Spin-Bahn-Kopplung

ein weiterer relativistischer Effekt! (→ Dirac-Gl.)

heuristisch, qualitativ: im Ruhesystem des Elektrons: (kein Inertialsystem!)

- Magnetfeld $\vec{B} = -\vec{v}\times\vec{E}/c$ mit $\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi = -\frac{\vec{x}}{|\vec{x}|}\frac{\partial\phi}{\partial r}$?
- Spin koppelt an dieses Magnetfeld

$$-\frac{2e}{2mc}\vec{S}\cdot\vec{B} = -\frac{e}{mc^2}\vec{S}\cdot(\underbrace{\vec{v}}_{\vec{p}/m}\times\vec{x})\,\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\phi(r)$$

$$= \underbrace{\frac{1}{m^2c^2}\vec{S}\cdot\vec{L}\,\frac{1}{r}\frac{\partial V(r)}{\partial r}}$$

ist um Faktor 2 zu groß („Thomas-Faktor")

$\vec{S}\cdot\vec{L}$ vertauscht nicht mit L_3, S_3 (wohl aber mit $\vec{S}^2, \vec{L}^2, H_0$)

hat keine einfache Wirkung (Eigenzustände?) in unseren bisherigen Zuständen, auch radiale Gl. wird verändert

nächstes Kapitel! ⟹ (i) Störungsrechnung (ii) Drehimpulsaddition? (iii) zeitabh. Störungsr. für Übergänge