5. Spin-Bahn Kopplung

5.1. Phänomenologische Beschreibung

- Elektron im Atom sieht Kern als bewegte Ladung →
  damit existiert Strom und Magnetfeld f. Elektron

- Magnetfeld wirkt auf Elektron: insbesondere auf Spin

  dh: Kopplung von Bahnbewegg. d. e^- und Spin: $\underline{H}_{S-B}$

  S-B: Spin-Bahn Kopplung

- Biot-Savart Gesetz:
  (Strom d. Kerns → Magnetfeld am Ort $\vec{r}$)

$$\underset{\substack{\text{auf}\\ \text{Elektron } \vec{r}}}{\vec{B}_{Kern}}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi}\int_{V' \text{ ganzer Raum}} d^3r' \, \frac{(\vec{r}-\vec{r}\,')\times \vec{j}_{Kern}(\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|^3}$$

$$\vec{j}_{Kern}(\vec{r}\,') = q_{Kern}\, \delta(\vec{r}\,' - \underset{\substack{\uparrow\\ \text{Kern bei 0 angesetzt}}}{0})\, \dot{\vec{r}} \quad \leftarrow \text{Relativgeschwindigkeit Kern vs. Elektron}$$

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi}\, q_{Kern}\, \frac{\vec{r}\times\dot{\vec{r}}}{|\vec{r}|^3}$$

Magnetfeld auf Elektron durch Relativbewegung zum Kern

$$= \frac{\mu_0}{4\pi}\,\frac{q_{Kern}}{m_{el}}\,\frac{\vec{L}}{|\vec{r}|^3}$$

$\vec{L}$: Drehimpuls d. Elektrons

dh: $\ell \neq 0$ → S-B Kopplung

$$= \frac{\mu_0 \cdot 4\pi\varepsilon_0}{4\pi\, m_{el}} \cdot \frac{q_{Ker}}{4\pi\varepsilon_0}\,\frac{\vec{L}}{r^3} = -\frac{1}{m_{el}c^2}\,\frac{1}{r}\,\frac{\partial}{\partial r}\phi_{Kern}\,\vec{L}$$

c: Vakuumlichtgeschwindigkeit, $\phi_{Kern} = \frac{q_{Kern}}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}$

$$\underline{H}_{S-B} = -\vec{\mu}_S \cdot \vec{B} = \frac{q_{el}}{2m_{el}} g\, \vec{S} \cdot \frac{1}{m_{el} c^2 r} \phi'_{Kern}\, \vec{L} \equiv g(\vec{r})\, \vec{L} \cdot \vec{S}$$

$g = 2$ f. Elektron (siehe VL zu Spin)

$$g(\vec{r}) = \frac{q_{el}}{c^2 m_{el}^2 r} \phi'_{Kern}(\vec{r})$$

Spin-Bahn-Kopplung existiert f. Bewegung im Kernpotential und wird Effekt f. $l \neq 0$ Zustände hervorrufen.

$$\boxed{\underline{H}_{Spin-Bahn} = g(r)\, \vec{L} \cdot \vec{S}}$$

Hamiltonian der Spin-Bahn Kopplung

Bemerkungen:

a) vernünftige Herleitung nur im Rahmen der Diracgleichung (QM II) möglich:

$$g(r) \rightarrow \underline{\underline{\frac{1}{2}}}\, g(r)$$

b) typisch relativistische Kopplung:

Energieverschiebung $\Delta E \sim E_{Ryd} \cdot \alpha^2 \hat{=}$ klein!

$\alpha = \frac{1}{137}$ Feinstrukturkonstante

c) Problem: $\vec{L} \cdot \vec{S}$ verkoppelt Spin und Bahn

Wellenfunktion nicht mehr Produkt aus

Bahn und Spinanteil $f(\vec{r})\, g(\vec{s})$

$\rightarrow$ Quantenzahlen m_s und m_e sind nicht mehr tauglich Zustände zu charakterisieren

5.2. Vollständiges Satz v. Observablen bei Spin-Bahn Kopplung

Vollständiges Satz v. Observablen (untereinander vertauschbar + gemeinsame Eigenfunktionen) legt bei Messung den Zustand eindeutig fest:

a) ohne Spin-Bahn, H-Atom : $\varphi(\vec{r}) = R_{ne}(r)\, Y_{em_e}(\vartheta,\varphi)\, \vec{\chi}_{sm_s}$

Notation $= |\vec{r}: n, l, m_e;\ \vec{s}: s, m_s\rangle$, $\vec{r}, \vec{s}$ weglassen

$$\underline{H}\, |n, l, m_e, s, m_s\rangle = E_n\, |n, l, m_e, s, m_s\rangle$$

$$\underline{L}^2\, |-"-\rangle = \hbar^2 l(l+1)\, |-"-\rangle$$

$$\underline{L}_z\, |-"-\rangle = \hbar m_e\, |-"-\rangle$$

$$\underline{S}^2\, |-"-\rangle = \hbar^2 \frac{3}{4}\, |-"-\rangle$$

$$\underline{S}_z\, |-"-\rangle = \hbar m_s\, |-"-\rangle$$

$\{\underline{H}, \underline{L}^2, \underline{L}_z, \vec{\underline{S}}^2, \underline{S}_z\}$ vollständiger Satz

b) mit Spin-Bahn, H-Atom

es entfallen m_s, m_e zur Charakterisierung weil $\underline{L}_z$ und $\underline{S}_z$ nicht mit $\underline{H}_{S-B}$ kommutieren:

$$\left[\underline{L}_z, \underline{H}_{SB} \right] \cong \left[\underline{L}_z, \vec{\underline{L}} \cdot \vec{\underline{S}} \right] = \left[\underline{L}_z, \sum_i \underline{L}_i \underline{S}_i \right]$$

$$= \left[\underline{L}_z, \underline{L}_x \underline{S}_x \right] + \left[\underline{L}_z, \underline{L}_y \underline{S}_y \right]$$

$$= i\hbar \left(\underline{L}_y \underline{S}_x - \underline{L}_x \underline{S}_y \right) \neq 0$$

L_z und $\underline{H}$ haben kein gemeinsamen Eigenfunktionen

analog: $\left[S_z, \vec{L} \cdot \vec{S} \right] = -i\hbar \left(S_x L_y - S_y L_x \right) \neq 0$

S_z und $\underline{H}$ haben keine gemeinsame Eigenfunktionen

<u>aber</u>: $\left[\underline{S}_z + \underline{L}_z, L \cdot S \right] = 0$

$\longrightarrow$ Def. der Summe von $\vec{S} + \vec{L} = \vec{J}$ ist Gesamtdrehimpuls,

dieser vertauscht mit $\underline{H}$, inklusive Spin-Bahn Kopplung

S_z und L_z werden durch J_z und $\vec{J}^2$ ersetzt

Such Eigenfunktion zu $\left\{ \underline{H}, \underline{\vec{L}}^2, \underline{\vec{S}}^2, J_z, \vec{J}^2 \right\}$

$\hat{=}$ neuer vollständigen Satz v. Observablen

5.3. Eigenschaften d. Gesamtdrehimpulses

a) $\vec{J}$: Matrix $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

$$= \left(\begin{pmatrix} L_x & 0 \\ 0 & L_x \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} L_y & 0 \\ 0 & L_y \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} L_z & 0 \\ 0 & L_z \end{pmatrix} \right)$$

$$+ \frac{\hbar}{2} \left(\sigma_x , \sigma_y , \sigma_z \right)$$

σ_i : Spinmatrizen

b) aus $[L_i, L_j] = i\hbar L_k \varepsilon_{ijk}$ und $[S_i, S_j] = i\hbar S_k \varepsilon_{ijk}$

folgt: $[J_i, J_j] = i\hbar J_k \varepsilon_{ijk}$ durch Addition

c) $[J_i, \vec{J}^2] = 0$ folgt aus $[J_i, \vec{S}^2 + 2\vec{L}\cdot\vec{S} + \vec{L}^2] = 0$

Damit sind Drehimpulseigenschaften v. $\vec{J}$ gezeigt
und die Vertauschbarkeit v. J_z mit $\vec{J}^2$.
Und der oben angegebene Satz ist vollständig.

5.4. Eigenwerte, Eigenfunktionen von $\vec{J}$

$$J_z \vec{\varphi} = \lambda_1 \vec{\varphi} \;, \quad J^2 \vec{\varphi} = \lambda_2 \vec{\varphi} \;, \quad \vec{\varphi} = (\varphi_1, \varphi_2)$$

Eigenwerte λ_1, λ_2 und Eigenvektoren $\vec{\varphi}$ sind zu bestimmen

$$\varphi_1 = \left(\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}\right)^{1/2} a(r)\, Y_{l m_j - \frac{1}{2}}$$

$$\varphi_2 = -\left(\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}\right)^{1/2} a(r)\, Y_{l m_j + \frac{1}{2}}$$

für $j = l + \frac{1}{2}$

$$\varphi_1' = \left(\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}\right)^{1/2} a(r)\, Y_{l m_j - \frac{1}{2}}$$

$$\varphi_2' = \left(\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}\right)^{1/2} a(r)\, Y_{l m_j + \frac{1}{2}}$$

für $j = l - \frac{1}{2}$

$\lambda_1^{(1)} \hat{=} \hbar m_j : \{-j, -j+1, \dots\ j\}$ d.h. $m_j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2} \dots$

$\lambda_2^{(1)} \hat{=} \hbar^2 j(j+1)$, $j = l \pm \frac{1}{2}$ d.h.: $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2} \dots$

$a = a(r)$ vom Radius abhängig

Verfahren: Zustand abhängig von n (Quantzahl $a(r)$)

von l $\rightarrow$ festgelegt $\rightarrow$ $j = l \pm \frac{1}{2}$

von $j = l \pm \frac{1}{2}$ Bsp: $l = 1 \rightarrow j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$

von $m_{j=\frac{1}{2}} = \pm\frac{1}{2}$, $m_{j=\frac{3}{2}} = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}$

Die neuen Zustände sind Überlagerungen der alten (m_s, m_l) Zustände, siehe ÜA,

die Koeffizienten heißen Clebsch-Gordan Koeffizienten. (Wigner!)

Beide Spinkomponenten $\pm\frac{1}{2}$ tragen zur neuen Wellenfunktion bei

5.5. Auswertung der Spin-Bahn Kopplung

$H_{S-B} = g(r)\,\vec{L}\cdot\vec{S}$ führt zu Energiekorrektur

Erwartungswert f. Spin-Bahn Kopplung berechnen:

$$\vec{S}\cdot\vec{L}\,|n,l,s,j,m_j\rangle$$

(verwende: $\vec{J}^2 = (\vec{S}+\vec{L})^2 = (\vec{S}^2 + 2\vec{L}\cdot\vec{S} + \vec{L}^2)$

$$\vec{S}\cdot\vec{L} = \frac{1}{2}\left(\vec{J}^2 - \vec{S}^2 - \vec{L}^2\right)$$)

$$= \frac{1}{2}\left(\vec{J}^2 - \vec{S}^2 - \vec{L}^2\right)|n,l,s,j,m_j\rangle$$, Eigenwertproblem verwenden

$$= \underbrace{\frac{1}{2}\hbar^2\left(j(j+1) - \frac{3}{4} - l(l+1)\right)}_{*}|n,l,s,j,m_j\rangle$$

2 Fälle: $j = l \pm \frac{1}{2}$, f. $l = 0 \rightarrow j = \frac{1}{2}$

a) $j = l + \frac{1}{2} \leadsto * = \frac{1}{2}\hbar^2\left((l+\frac{1}{2})(l+\frac{3}{2}) - \frac{3}{4} - l^2 - l\right) = \underline{\underline{\frac{1}{2}l\hbar^2}}$

b) $j = l - \frac{1}{2} \leadsto * = \frac{1}{2}\hbar^2\left((l-\frac{1}{2})(l+\frac{1}{2}) - \frac{3}{4} - l^2 - l\right) = \underline{\underline{-\frac{1}{2}(l+1)\hbar^2}}$

c) $j = \frac{1}{2} \leadsto * = \frac{1}{2}\hbar^2\left(\frac{3}{4} - \frac{3}{4}\right) = 0$

f. $l \neq 0$, ab p-Zustände aufwärts ist ein endliche Energiekorrektur zu erwarten, diese ist verschieden f. $j = l \pm \frac{1}{2}$

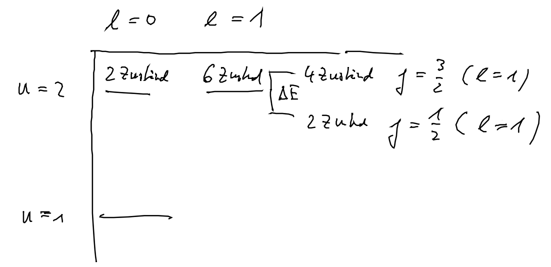
$$\int d^3 \quad \varphi^*(r) \quad \underline{H}_{SB} \quad \varphi(\vec{r})$$

$$\Delta E = \langle n l s j m_j | \underline{H}_{S-B} | n l s j m_j \rangle \quad \hat{=} \text{ Erwartungswert}$$

$$= \begin{pmatrix} l \\ -(l+1) \end{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2} \frac{e^2 Z}{8\pi \varepsilon_0 m^2 c^2} \cdot \langle n l s j m_j | \frac{1}{r^3} | n l s j m_j \rangle \quad \begin{matrix} j = \frac{3}{2} \\ j = \frac{1}{2} \end{matrix}$$

$$E_n \longrightarrow E_{nl} = E_{nj}$$

Wasserstoff   mit H_{S-B}



Die Energie bei H-Atom ist von Hauptquantenzahl n abhängig und von der Quantenzahl d. Bahndrehimpulses j abhängig.

Es gibt weitere relativistische Korrekturen die Bild bzgl. der energetischen Lage.