

5. Spin-Bahn Kopplung

5.1. Phänomenologische Beschreibung

- Elektron im Atom sieht Kern als bewegte Ladung \rightarrow damit existiert Strom und Magnetfeld f. Elektron
 - Magnetfeld wirkt auf Elektron: insbesondere auf Spin
dh: Kopplung von Bahn bewegg. d. e^- und Spin: S-B
- S-B: Spin-Bahn Kopplung

- Biot-Savart Gesetz: $\vec{B}_{\text{Kern auf Elektron}}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{V' \text{ Kernraum}} d\vec{r}' \frac{(\vec{r} - \vec{r}') \times \vec{j}_{\text{Kern}}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3}$

(Strom \rightarrow Magnetfeld)
d.Kerns am Ort \vec{r}'

$\vec{j}_{\text{Kern}}(\vec{r}') = q_{\text{Kern}} \delta(\vec{r}' - 0) \vec{v}_{\text{Kern}}$ \leftarrow Relativ geradlinig mit Kern vs. Elektron
Kern bei 0 ausgerichtet

$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} q_{\text{Kern}} \frac{\vec{r} \times \vec{v}_{\text{Kern}}}{|\vec{r}|^3}$ Magnetfeld auf Elektron durch Relativbewegung zum Kern

$= \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{q_{\text{Kern}}}{m_e} \frac{\vec{L}}{|\vec{r}|^3}$ \vec{L} : Drehimpuls d. Elektrons
dh: $L \neq 0 \rightarrow$ S-B Kopplung

$= \frac{\mu_0 \cdot 4\pi \epsilon_0}{4\pi m_e} \cdot \frac{q_{\text{Kern}}}{4\pi \epsilon_0} \frac{\vec{L}}{r^3} = -\frac{1}{m_e c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \phi_{\text{Kern}} \vec{L}$

c : Vakuumlichtgeschwindigkeit, $\phi_{\text{Kern}} = \frac{q_{\text{Kern}}}{4\pi \epsilon_0} \frac{1}{r}$

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

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

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

Spin-Bahn-Kopplung existiert f. Bewegung im Kernpotential und wird Effekte f. $l \neq 0$ Zustände hervor rufen.

$\underline{H}_{\text{Spin-Bahn}} = g(r) \vec{L} \cdot \vec{S}$	Hamiltonian der Spin-Bahn Kopplung
---	---------------------------------------

Bemerkung:

a) vernünftige Herleitung nur im Rahmen der

Dirac Gleichung (QM II) möglich:

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

b) typisch relativistische Kopplung:

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

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

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

Wellenfunktion wird mehr Produkt aus

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

→ Quantenzahlen m_s und m_l sind nicht mehr tauglich Zustände zu charakterisieren

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

Vollständiger Satz v. Observablen (untereinander vertauschbar)
+ gemeinsame Eigenfunktionen

legt bei Messung den Zustand eindeutig fest:

a) ohne Spin-Bahn, H-Atom : $\psi(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \vec{\chi}_{sm_s}$
Notation = $|\vec{r}: n, l, m_l; \vec{s}: s, m_s\rangle, \vec{r}, \vec{s}$ weglassen

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

$$\underline{L}^2 |n, l, m_l, s, m_s\rangle = \hbar^2 l(l+1) |n, l, m_l, s, m_s\rangle$$

$$\underline{L}_z |n, l, m_l, s, m_s\rangle = \hbar m_l |n, l, m_l, s, m_s\rangle$$

$$\underline{S}^2 |n, l, m_l, s, m_s\rangle = \hbar^2 \frac{3}{4} |n, l, m_l, s, m_s\rangle$$

$$\underline{S}_z |n, l, m_l, s, m_s\rangle = \hbar m_s |n, l, m_l, s, m_s\rangle$$

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

b) mit Spin-Bahn, H-Atom

es entfallen m_s, m_l zur Charakterisierung weil

\underline{L}_z und \underline{S}_z nicht mit \underline{H}_{S-B} kommutieren:

$$\begin{aligned}
[L_z, H_{SB}] &\approx [L_z, \vec{L} \cdot \vec{S}] = [L_z, \sum_i L_i S_i] \\
&= [L_z, L_x S_x] + [L_z, L_y S_y] \\
&= i\hbar (L_y S_x - L_x S_y) \neq 0
\end{aligned}$$

L_z und H haben keine gemeinsamen Eigenfunktionen

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

S_z und H haben keine gemeinsamen Eigenfunktionen

$$\text{aber: } [S_z + L_z, \vec{L} \cdot \vec{S}] = 0$$

→ Def. der Summe von $\vec{S} + \vec{L} = \vec{J}$ ist Gesamtdrehimpuls,
dieser vertauscht mit H , inklusive Spin-Bahn-Kopplung

S_z und L_z werden durch J_z und J^2 ersetzt

Sind Eigenfunktionen zu $\{H, \vec{L}^2, \vec{S}^2, J_z, J^2\}$

≙ New vollständigen Satz v. Observablen

5.3. Eigenschaften d. Gesamtdrehimpulses

$$\begin{aligned}
 \text{a) } \vec{j} : \text{ Matrix } \vec{j} &= \vec{L} + \vec{S} \\
 &= \left(\begin{pmatrix} L_x & 0 \\ 0 & L_x \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} L_y & 0 \\ 0 & L_y \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} L_z & 0 \\ 0 & L_z \end{pmatrix} \right) \\
 &+ \frac{\hbar}{2} \left(\begin{matrix} \sigma_x & & \\ & \sigma_y & \\ & & \sigma_z \end{matrix} \right)
 \end{aligned}$$

σ_i : Spinmatrizen

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

$$\text{folgt: } [j_i, j_j] = i\hbar j_k \varepsilon_{ijk} \text{ durch Addition}$$

$$\text{c) } [j_i, \vec{j}^2] = 0 \quad \text{folgt aus } [j_i, \vec{s}^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S} + \vec{L}^2] = 0$$

Damit sind Drehimpuls eigenvektoren v. \vec{j} gezeigt

und die Kommutator v. j_z mit \vec{j}^2 .

Und das 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 Eigenvektor $\vec{\varphi}$ sind zu bestimmen

$$\begin{aligned}
 \varphi_1 &= \left(\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l+1} \right)^{1/2} a(r) Y_{lm_j - \frac{1}{2}} \\
 \varphi_2 &= - \left(\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l+1} \right)^{1/2} a(r) Y_{lm_j + \frac{1}{2}}
 \end{aligned}
 \left. \vphantom{\begin{aligned} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{aligned}} \right\} \text{für } j = l + \frac{1}{2}$$

$$\begin{aligned}
 \varphi_1' &= \left(\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l+1} \right)^{1/2} a(r) Y_{lm_j - \frac{1}{2}} \\
 \varphi_2' &= \left(\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l+1} \right)^{1/2} a(r) Y_{lm_j + \frac{1}{2}}
 \end{aligned}
 \left. \vphantom{\begin{aligned} \varphi_1' \\ \varphi_2' \end{aligned}} \right\} \text{für } j = l - \frac{1}{2}$$

$$\lambda_1^{(1)} = \hbar m_j \left\{ j, -j+1, \dots, j \right\} \text{ d.h. } m_j = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots$$

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

$a = a(r)$ von Radius abhängig

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

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

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 Überlagerung der alten (m_1, m_2) Zustände, siehe ÜA, die Koeffizienten heißen Clebsch-Gordan Koeffizienten. (Wigner!)

Bei Spin koppelt $\pm \frac{1}{2}$ hinzu zur neuen Wellenfunktion bei

5.5. Auswertung der Spin-Bahn-Kopplung

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

Erwartungswert f. Spin-Bahn-Kopplung berechnen:

$$\begin{aligned} & \vec{S} \cdot \vec{L} \quad |n, \ell, s, j, m_j\rangle \\ \left(\text{verwenden: } \vec{J}^2 = (\vec{S} + \vec{L})^2 = (\vec{S}^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S} + \vec{L}^2) \right. \\ & \left. \vec{S} \cdot \vec{L} = \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - \vec{S}^2 - \vec{L}^2) \right) \end{aligned}$$

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

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

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

$$a) \quad j = \ell + \frac{1}{2} \quad \Downarrow \quad * = \frac{1}{2} \hbar^2 \left((\ell + \frac{1}{2})(\ell + \frac{3}{2}) - \frac{3}{4} - \ell^2 - \ell \right) = \frac{1}{2} \ell \hbar^2$$

$$b) \quad j = \ell - \frac{1}{2} \quad \Downarrow \quad * = \frac{1}{2} \hbar^2 \left((\ell - \frac{1}{2})(\ell + \frac{1}{2}) - \frac{3}{4} - \ell^2 - \ell \right) = \frac{1}{2} (\ell + 1) \hbar^2$$

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

f. $\ell \neq 0$, ab p -Zustände aufwärts ist unendlich

Energiekorrektur zu erwarten, diese ist verschieden f. $j = \ell \pm \frac{1}{2}$

$$\Delta E = \int d^3 r \varphi^*(r) \hat{H}_{SD} \varphi(r) \stackrel{!}{=} \text{Erwartungswert}$$

$$= \begin{pmatrix} l \\ -(l+1) \end{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2} \frac{e^2 z}{8\pi\epsilon_0 \mu^2 c^2} \cdot \langle u l s j m_j | \frac{1}{r^3} | u l s j m_j \rangle \quad \begin{matrix} j = \frac{3}{2} \\ j = \frac{1}{2} \end{matrix}$$

$E_n \longrightarrow \bar{E}_{ne} = E_{nj} \quad n=2$
 Wasserstoff mit H_{S-B}

$l=0$	$l=1$
2 Zustände	6 Zustände
ΔE	
4 Zustände $j = \frac{3}{2} (l=1)$	2 Zustände $j = \frac{1}{2} (l=1)$
$n=1$	

Die Energie bei H_{S-B} ist von Hauptquantenzahl n abhängig und von der Quantenzahl d. Bahndrehimpulses l abhängig.

Es gilt weiterhin relativistische Korrekturen die Bild bzgl. der energetisch Lage.