

Wellen und Quantenphysik

1. Eigenschaften von Wellen

2. Interferenz und Beugung

3. Relativitätstheorie

4. Welle-Teilchen Dualismus

5. Atome

- Die frühe Atomphysik
- Die Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms
- Atome mit vielen Elektronen

6. Elektronische Eigenschaften von Festkörpern

Stern-Gerlach Experiment

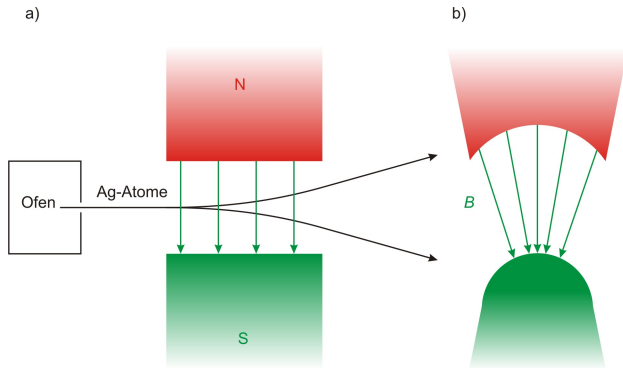
Atome

Die Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms

- Die Schrödinger Gleichung
- Das Kastenpotential
- Bahndrehimpuls
- Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom
- normaler Zeeman Effekt
- Das Stern-Gerlach Experiment und der Spin des Elektrons
- Spin-Bahn-Kopplung
- Addition von Drehimpulsen

Stern-Gerlach Experiment & Spin des Elektrons 1

Beim Stern-Gerlach Experiment wird ein Strahl aus Silberatomen durch ein inhomogenes Magnetfeld geleitet, um die Richtungsquantisierung von $\vec{L}$ nachzuweisen (Otto Stern und Walther Gerlach 1922)



Stern-Gerlach Experiment 1

Kommentar 1

Der Zeemaneffekt kann im Rahmen des Bohrschen Atommodells verstanden werden, wenn man annimmt, dass der Drehimpuls in Richtung des Magnetfelds quantisiert ist. (Die Schrödinger Gleichung ergibt den Effekt zwanglos - nicht aber das Bohrsche Atommodell)

Dieser Effekt wird Richtungsquantelung genannt und wurde seit 1916 diskutiert.

1922 versuchten Otto Stern und Walther Gerlach diese Frage experimentell zu beantworten.

Die Abbildung skizziert den experimentellen Aufbau.

Atome werden in einem Ofen verdampft.

Stern-Gerlach 1

Kommentar 2

Durch Blenden und einen Geschwindigkeitsfilter wird ein Atomstrahl geformt, der aus Atomen mit einer bestimmten Geschwindigkeit besteht.

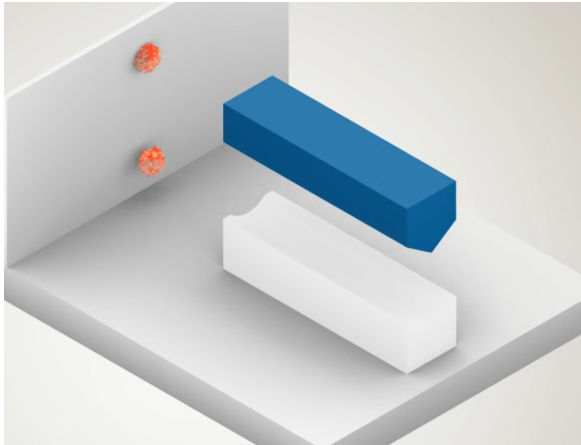
Der Atomstrahl wird durch ein inhomogenes Magnetfeld geführt.

Da ein magnetisches Moment in einem inhomogenen Magnetfeld eine Kraft erfährt, wird der Atomstrahl abgelenkt.

Das inhomogene Magnetfeld wird durch die Form der Polschuhe des verwendeten Magneten bestimmt.

Die Skizze a) zeigt die Seitenansicht und die Skizze b) eine Ansicht in Richtung des Atomstrahls.

Stern-Gerlach Experiment & Spin des Elektrons 2



(SternGerlachexperiment.mp4)

Stern-Gerlach Experiment 2

Kommentar

Das Video zeigt eine Animation des Experiments mit klassischen und quantisierten magnetischen Momenten.

Stern-Gerlach Experiment & Spin des Elektrons 3

Für die Kraft auf ein magnetisches Moment in einem inhomogenen Magnetfeld gilt

$$\underline{\vec{F} = (\vec{\mu} \nabla) \vec{B}}$$

Wird der Einfachheit halber angenommen $\vec{B} \parallel \hat{z}$ und $\frac{\partial B}{\partial z} \neq 0$, dann ist die Kraft

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z}$$

- Von einem klassischen magnetischen Moment können alle Orientierungen bezüglich der z-Achse eingenommen werden: $\mu_z = |\vec{\mu}| \cos \theta$.
- Das Experiment ergibt für Silberatome eine zweifache Aufspaltung!

Stern-Gerlach Experiment 3

Kommentar 1

Die Kraft, die auf ein magnetisches Moment in einem Magnetfeld wirkt, kann berechnet werden, wenn Nabla auf die potentielle Energie eines Moments im Magnetfeld angewendet wird, d.h. $\vec{F} = -\nabla(-\vec{\mu}\vec{B})$.

Eine kleine Rechnung ergibt die rot unterstrichene Formel.

z.B. $F_x = \mu_x \partial_x B_x + \mu_y \partial_x B_y + \mu_z \partial_x B_z$. Mit der 4. Maxwell-Gleichung ohne Strom und keinem dynamischen elektrischen Feld, d.h. $\nabla \times \vec{B} = 0$ gilt

$\partial_x B_y = \partial_y B_x$ und $\partial_x B_z = \partial_z B_x$, so dass sich die rot unterstrichene Formel ergibt.

Nimmt man an, dass das magnetische Feld exakt entlang der z-Richtung orientiert ist und es auch nur in der z-Richtung einen Gradienten des magnetischen Feldes gibt, dann ergibt sich für die Kraft die blau geschriebene Formel.

Gibt es keine Richtungsquantisierung, dann kann das magnetische Moment alle Richtungen bezüglich der z-Richtung einnehmen, so dass sich eine kontinuierliche Verteilung der Atome ergibt, die mit einem Schirm aufgefangen werden.

Stern-Gerlach Experiment 3

Kommentar 2

Stern und Gerlach haben für das Experiment Silberatome verwendet und eine klare Aufspaltung des Atomstrahls in zwei Komponenten beobachtet.

Dieses Ergebnis zeigte, dass es die Richtungsquantisierung des Drehimpulses gegeben muss.

Die zweifache Richtungsquantisierung wurde dem Drehsinn des Elektrons zugeordnet, dem man demnach eine zweiwertige Richtungsquantenzahl zuordnen muss.

Man stellte sich dazu das Elektron als ein rotierendes geladenes Kügelchen vor.

Das magnetische Moment ergibt sich in diesem Bild aufgrund der rotierenden Ladung.

Stern-Gerlach Experiment 3

Kommentar 3

Der Eigendrehimpuls des Elektrons wird Spin genannt.

Nimmt man das Bild eines rotierenden Kügelchens jedoch ernst, dann findet man aus der Forderung, dass die Geschwindigkeit der Kugeloberfläche die Lichtgeschwindigkeit nicht übersteigen darf, einen Radius des Elektrons, der unrealistisch groß ist.

Stern-Gerlach Experiment & Spin des Elektrons 4

Pauli-Matrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Spinoperator des Elektrons

$$\hat{\vec{s}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix}$$

Spin des Elektrons 4

Kommentar 1

Das Problem wurde 1927 von Paul Dirac gelöst, indem er eine Schrödingergleichung für das Elektron aufstellte, welche mit der Relativitätstheorie kompatibel ist.

Dazu darf der Hamiltonoperator nicht das Quadrat des Impulsoperators, sondern nur den Impulsoperator selbst enthalten.

Die zweifache Anwendung dieser Schrödingergleichung muss dann die Klein-Gordon-Gleichung ergeben, d.h. es muss statt $E = \vec{p}^2/2m$ die relativistische Formel $E^2 = c^2\vec{p}^2 + m^2c^4$ gelten.

Paul Dirac löst diese Aufgabe 1927, indem er 4×4 -Matrizen einführt, die aus den Paulimatrizen aufgebaut sind.

Die rot umrandeten Formeln zeigen die Pauli-Matrizen.

Spin des Elektrons 4

Kommentar 2

Die Theorie von Dirac ergibt, dass das Elektron ein magnetisches Moment hat und einen Eigendrehimpuls - den Spin.

Wie beim Bahndrehimpuls gibt es zum Spin einen Spinoperator.

Der Spinoperator ist ein Vektor, dessen Komponenten die Paulimatrizen sind.

Dieser Drehimpulsoperator ist offensichtlich kein Differentialoperator, der auf räumliche Koordinaten angewendet wird.

Folglich sind die Eigenzustände auch keine Wellenfunktionen, sondern schlicht die Zahlentupel

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Stern-Gerlach Experiment & Spin des Elektrons 5

Eigenwertgleichungen für $\hat{s}_z$

$$\hat{s}_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = +\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{s}_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Eigenwertgleichung für $\hat{s}^2$

$$\begin{aligned} \hat{s}^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} &= \frac{\hbar^2}{2^2} (\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{3\hbar^2}{2^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Spin des Elektrons 5

Kommentar 1

Die ersten beiden Zeilen zeigen die Eigenwertgleichungen für die z-Komponente des Spinoperators $\hat{s}_z$.

Für das Quadrat des Spinoperators muss jeweils das Quadrat der Pauli-Matrizen berechnet werden.

Wird eine Pauli-Matrix mit sich selbst multipliziert, dann ergibt sich immer die Einheitsmatrix $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Die beiden Zahlentupel $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ erfüllen somit auch die Eigenwertgleichung für das Quadrat des Spinoperators.

Spin des Elektrons 5

Kommentar 2

Die Eigenwertgleichung für den Spin entsprechen den Eigenwertgleichungen, die sich für den Bahndrehimpuls $\vec{L}$ ergaben.

Die Eigenwerte des Spins sind $s = 1/2$ und $m_s = \pm 1/2$.

Der Spinoperator wirkt nicht auf räumliche Koordinaten und der Spin ist offensichtlich nicht mit einer räumlichen Drehung verbunden.

Mit den Quantenzahlen für die z-Komponente $m_s = \pm 1/2$ ergibt sich mit den Eigenfunktionen von $\hat{L}_z$: $\exp^{im\varphi}$ bei einer Drehung um 360° ein Vorzeichenwechsel der Wellenfunktion.

Mit dem Spin des Elektrons verlässt man definitiv den Bereich der klassischen Physik.

Spin des Elektrons 5

Kommentar 3

Die Wellenmechanik von de Broglie und Schrödinger ist eine Verallgemeinerung der klassischen Mechanik.

Der Spin des Elektrons ist jedoch nicht auf eine Drehung des Elektrons zurückzuführen und das magnetische Moment des Elektrons nicht auf einen elektrischen Strom.

Die Wellenmechanik erweitert sich zur Quantenmechanik.

Stern-Gerlach Experiment & Spin des Elektrons 6

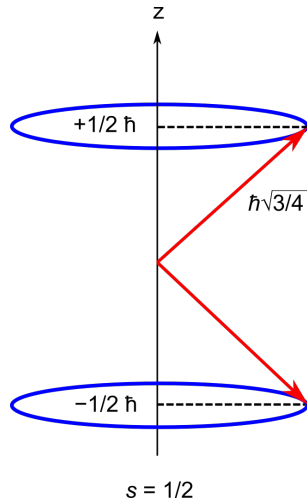
$$\underline{s = \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad m_s = \pm \frac{1}{2}}$$

Das Elektron hat ein magnetisches Moment

$$\vec{\mu}_e = -g\mu_B \vec{s} / \hbar$$

Der g-Faktor hat den Wert

$$\underline{g = 2,00231930436256(35)}$$



Spin des Elektrons 6

Kommentar 1

Wie beim Bahndrehimpuls kann man sich auch den Spinvektor des Elektrons veranschaulichen.

Die z-Komponente ist durch die Eigenwerte $+\hbar/2$ bzw. $-\hbar/2$ festgelegt.

Die x- und die y-Komponenten sind wie beim Bahndrehimpuls nicht durch Eigenwertgleichungen bestimmt.

Nur die Länge des Drehimpulsvektors (genau: $\hat{s}^2$) ist zusätzlich zur z-Komponente durch eine Eigenwertgleichung bestimmt.

Der Drehimpulsvektor befindet sich irgendwo auf einem Kegel um die z-Achse.

Die genaue Position bleibt unbestimmt.

Spin des Elektrons 6

Kommentar 2

Die Theorie von Dirac ergibt, dass der Spin des Elektrons wie auch der Bahndrehimpuls mit einem magnetischen Moment verknüpft ist.

Der einzige Unterschied besteht in einem Vorfaktor, den man den g-Faktor (das gyromagnetische Verhältnis) des Elektrons nennt.

Die Dirac-Theorie ergibt für den g-Faktor den exakten Wert 2.

Die rot umrandete Formel gibt das magnetische Moment des Elektronenspins.

Der tatsächliche Wert des g-Faktors weicht etwas von 2 ab und ist mit enormer Genauigkeit bekannt.

Die Standardabweichung beträgt $3,5 \cdot 10^{-13}$. Diese Genauigkeit wird sowohl im Experiment als auch in der Theorie (Quantenelektrodynamik) erreicht.

Spin des Elektrons 6

Kommentar 3

Der Grund für die Abweichung liegt in der Unschärferelation.

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung bzw. Dirac-Gleichung berücksichtigt nicht, dass das Vakuum aufgrund der Unschärferelation nicht stabil ist.

Es entstehen im Rahmen der Unschärferelation Teilchen-Antiteilchen-Paare (z.B. Elektron-Positron-Paare), deren Lebensdauer durch die Zeit-Energie-Unschärfe bestimmt ist.

Der Einfluss dieser Teilchen muss mittels der zeitabhängigen Schrödingergleichung erfasst werden, was nur im Rahmen einer Störungsrechnung möglich ist.

Die zeitunabhängige Dirac-Gleichung stellt in diesem Zusammenhang die 0-te Näherung dar. Die Störungsrechnung der Zeitabhängigkeit ist als Quantenelektrodynamik (QED) bekannt.

Stern-Gerlach Experiment & Spin des Elektrons 7

Dirac-Notation zur Beschreibung von Quantenzuständen

$$|\text{Quantenzahl}_1, \text{Quantenzahl}_2, \dots\rangle$$

Spinquantenzahlen

$$s = \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \quad \rightarrow \quad |s = \frac{1}{2}, m_s = \pm \frac{1}{2}\rangle$$

Eigenzustände des Spins

$$|1/2, +1/2\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad |1/2, -1/2\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Spin des Elektrons 7

Kommentar 1

Da die Eigenzustände des Drehimpulses einerseits durch die Kugelflächenfunktionen $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$ und andererseits durch die beiden Zahlentupel $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ beschrieben werden, führt Dirac eine allgemeinere Schreibweise für Quantenzustände ein, die als die Dirac-Notation bekannt ist.

Diese Notation beschränkt sich auf die Quantenzahlen, die einen Quantenzustand beschreiben.

Die Quantenzahlen werden in eine Klammer geschrieben, welche die Form $|\dots\rangle$ hat.

Die erste rot umrandete Formel zeigt die Dirac-Notation. Die Klammer wird allgemein als „Ket“ bezeichnet.

Spin des Elektrons 7

Kommentar 2

Für den Spin mit den Quantenzahlen $s = 1/2$ und $s_z = \pm 1/2$ ergeben sich die Kets, die in der zweiten rot umrandeten Formel angegeben sind.

Was sich konkret hinter dem Ket-Symbol verbirgt (Wellenfunktion oder Zahlentupel), wird als Darstellung des Quantenzustands bezeichnet.

Es zeigt sich, dass häufig die Kenntnis der Quantenzahlen genügt, wenn die Energieeigenwerte der Schrödingergleichung berechnet werden sollen.

Stern-Gerlach Experiment & Spin des Elektrons 8

Vergleich von Bahndrehimpuls und Spin

Eigenwertgleichungen für den Bahndrehimpuls (Dirac-Notation: $|\ell, m\rangle \hat{=} Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)$)

$$\hat{L}_z |\ell, m\rangle = m\hbar |\ell, m\rangle$$

$$\hat{L}^2 |\ell, m\rangle = \ell(\ell + 1)\hbar^2 |\ell, m\rangle$$

Eigenwertgleichungen für den Spin

$$\hat{S}_z |s, m_s\rangle = m_s\hbar |s, m_s\rangle$$

$$\hat{S}^2 |s, m_s\rangle = s(s + 1)\hbar^2 |s, m_s\rangle$$

Spin des Elektrons 8

Kommentar 1

Die beiden rot umrandeten Formelgruppen vergleichen die Eigenwertgleichungen für den Bahndrehimpuls und für den Spin des Elektrons.

In den Eigenwertgleichung für den Bahndrehimpuls werden statt der Kugelflächenfunktionen die Kets der Dirac-Notation verwendet.

Der Vergleich zeigt, worauf es beim Drehimpuls in der Quantenphysik ankommt.

In der Quantenphysik wird der Drehimpuls durch die beiden Eigenwertgleichungen für die z-Komponente und das Quadrat des Drehimpulsoperators definiert.

Für Bahndrehimpuls und Spin haben die Eigenwertgleichungen die gleiche Form, obwohl der Bahndrehimpuls und der Spin nicht unterschiedlicher sein könnten.

Spin des Elektrons 8

Kommentar 2

Der Bahndrehimpuls wird durch Differentialoperatoren bestimmt.

Die Eigenfunktionen sind die Kugelflächenfunktionen, mit denen die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Quantenteilchens bestimmt werden kann.

Die Operatoren des Spins sind Matrizen und die Eigenzustände Zahlentupel.

Wie der Bahndrehimpuls zeigt sich auch der Spin durch sein magnetisches Moment und durch die magnetischen Momente können Spin und Bahndrehimpuls identifiziert und charakterisiert werden.

Spin-Bahn-Kopplung

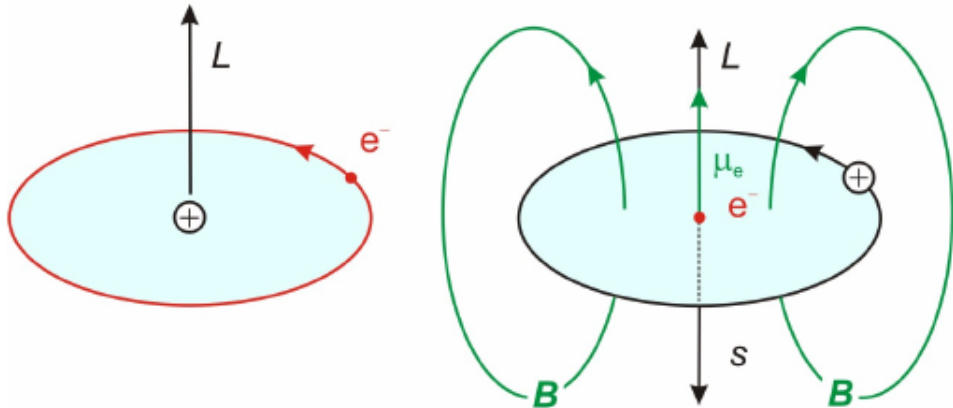
Atome

Die Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms

- Die Schrödinger Gleichung
- Das Kastenpotential
- Bahndrehimpuls
- Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom
- normaler Zeeman Effekt
- Das Stern-Gerlach Experiment und der Spin des Elektrons
- **Spin-Bahn-Kopplung**
- Addition von Drehimpulsen

Spin-Bahn-Kopplung 1

Das magnetische Moment des Elektrons richtet sich in dem Magnetfeld aus, das durch seine Bahnbewegung um den Atomkern erzeugt wird



Spin-Bahn-Kopplung 1

Kommentar 1

Das magnetische Moment des Elektrons und das magnetische Moment aufgrund seiner Bahnbewegung beeinflussen sich gegenseitig.

Wie für zwei Magnete, die aneinander hängen, gibt es auch für das magnetische Moment der Bahnbewegung und das magnetische Moment des Elektrons eine bestimmte Ausrichtung, für welche die Energie minimal wird.

Das Prinzip kann am einfachsten erkannt werden, wenn eine kreisförmige Bahnbewegung des Elektrons um den Atomkern betrachtet wird.

An dieser Stelle klingt wieder das Bohrsche Atommodell an, wobei numerische Korrekturen erwartet werden können, da die Kreisbewegung nur eine von vielen möglichen Elektronenbahnen ist.

Spin-Bahn-Kopplung 1

Kommentar 2

Die Kreisbewegung führt in einer klassisch anschaulichen Weise auf den Bahndrehimpuls, mit dem wiederum die Bewegung eines Quantenteilchens charakterisiert werden kann.

Die Skizze a) zeigt die kreisförmige Bahnbewegung des Elektrons um den Atomkern.

In Skizze b) wird die Bewegung aus der Sicht des Elektrons betrachtet.

Das Elektron ruht und der Atomkern bewegt sich auf einer kreisförmigen Bahn um das Elektron und führt zu einem Ringstrom, der das Elektron umgibt.

Gemäß dem Ampereschen Gesetz führt der Ringstrom zu einem magnetischen Feld, das in der Skizze durch grüne Magnetfeldlinien angedeutet ist.

Spin-Bahn-Kopplung 1

Kommentar 3

Man kann sich das Magnetfeld einer Leiterschleife vorstellen, durch die ein Strom fließt.

Die Richtung der Magnetfeldlinien ergibt sich mit der Regel der rechten Hand.

Zeigt der Daumen in Stromrichtung, dann zeigen die Finger die Richtung der Magnetfeldlinien an, wenn es sich um positive Ladungsträger handelt.

Auch die Richtung des Drehimpulsvektors wird durch die Regel der rechten Hand bestimmt.

Zeigen die Finger in Richtung der Geschwindigkeit des bewegten Teilchens, dann zeigt der Daumen die Richtung des Drehimpulsvektors an.

Spin-Bahn-Kopplung 1

Kommentar 4

Das magnetische Moment des Elektrons kann sich in diesem Magnetfeld ausrichten.

Ist die potentielle Energie minimal, dann steht das magnetische Moment des Elektrons parallel zu den Magnetfeldlinien.

Da der Spin und das magnetische Moment des Elektrons entgegengesetzt zueinander ausgerichtet sind, ergibt es sich, dass im Minimum der potentiellen Energie, der Spin des Elektrons und der Bahndrehimpuls entgegengesetzt zueinander ausgerichtet sind, wie es in der Skizze angedeutet wird.

Spin-Bahn-Kopplung 2

Ein elektrischer Ringstrom I erzeugt im Zentrum das magnetische Feld

$$\underline{B = \mu_0 \frac{I}{2r}}$$

Der Strom aufgrund der Bahnbewegung des Atomkerns mit der Kernladungszahl Z

$$\underline{I = \frac{Zev}{2\pi r}}$$

$$B = \mu_0 \frac{Zev}{4\pi r^2} = \mu_0 \frac{Zev}{4\pi r^2} \frac{\textcolor{green}{rm}}{\textcolor{green}{rm}} = \mu_0 \frac{Ze}{4\pi r^3 m} \textcolor{blue}{L}$$

Spin-Bahn-Kopplung 2

Kommentar 1

Diese Wechselwirkung zwischen dem magnetischen Moment der Bahn und dem magnetischen Moment des Spins wird Spin-Bahn-Kopplung genannt.

Die potentielle Energie dieser Wechselwirkung kann einfach mit Hilfe einer kreisförmigen Bahnbewegung abgeschätzt werden.

Das Magnetfeld im Zentrum einer kreisförmigen Leiterschleife, in der der Strom I fließt, ist durch die erste rot unterstrichene Formel gegeben.

Hat der Atomkern die Kernladungszahl Z und bewegt er sich mit der Geschwindigkeit v um das Elektron, dann ist der Strom durch die zweite rot unterstrichene Formel gegeben.

Dabei entspricht die Geschwindigkeit des Atomkerns der Geschwindigkeit des Elektrons, wie der soeben gezeigten Skizze entnommen werden kann.

Spin-Bahn-Kopplung 2

Kommentar 2

Mit dem Strom aufgrund der Bewegung des Atomkerns um das Elektron kann das Magnetfeld am Ort des Elektrons berechnet werden.

Wird diese Formel mit dem Produkt aus Bahnradius und der Masse des Elektrons erweitert, dann erkennt man, dass das Magnetfeld am Ort des Elektrons proportional zum Bahndrehimpuls ist.

Spin-Bahn-Kopplung 3

Potentielle Energie im Magnetfeld

$$E_{pot} = -\vec{\mu}_e \vec{B}$$

und

$$\vec{\mu}_e = -g\mu_B \vec{s} / \hbar$$

$$E_{pot} = g\mu_B^2 \frac{\mu_0}{2\pi} \frac{Z}{r^3} \frac{\vec{s} \cdot \vec{L}}{\hbar^2}$$

Hamilton Operator der Spin-Bahn-Wechselwirkung

$$\hat{H}_{SL} = \xi \frac{\hat{\vec{s}} \cdot \hat{\vec{L}}}{\hbar^2} \quad \text{und} \quad \xi > 0$$

Spin-Bahn-Kopplung 3

Kommentar 1

Mit der Formel für das Magnetfeld und der Formel für das magnetische Moment des Elektrons kann die potentielle Energie der Spin-Bahn-Kopplung aufgeschrieben werden.

Es ergibt sich die rot unterstrichene Formel. Die potentielle Energie der Spin-Bahn-Kopplung ist proportional zum Skalarprodukt von Spin und Bahndrehimpuls.

Diese Formel für die potentielle Energie wird zu einem Hamiltonoperator, wenn der Spin und der Bahndrehimpuls durch die Operatoren für den Spin und den Bahndrehimpuls ersetzt werden.

Spin-Bahn-Kopplung 3

Kommentar 2

Damit entfällt auch der Bezug zu einer kreisförmigen Elektronenbahn und der umfangreiche Vorfaktor kann durch einen Parameter ξ ersetzt werden, dessen Zahlenwert üblicherweise experimentell bestimmt wird.

Dieser Parameter ist eine positive Zahl, so dass Spin und Bahndrehimpuls im Minimum der Energie entgegengesetzt zueinander orientiert sind.

Spin-Bahn-Kopplung 4

Abschätzung: Mit dem Radius einer Bohrschen Bahn

$$r_n = \frac{a_B}{Z} n^2$$

erkennt man

$$\underline{\xi \propto \frac{Z^4}{n^6}}$$

Spin-Bahn-Kopplung 4

Kommentar 1

Möchte man den Vorfaktor berechnen, dann muss man mit der radialen Wellenfunktion des Elektrons seinen Mittelwert bestimmen.

Einen Eindruck von dem, was erwartet werden kann, ergibt sich, wenn der Abstand von Elektron und Atomkern durch den Bahnradius einer Bohrschen Bahn ersetzt wird.

Wird die schwarz geschriebene Formel für den Radius der Bohrschen Bahn in die Formel für den Vorfaktor eingesetzt, dann erkennt man, dass die Spin-Bahn-Kopplungskonstante proportional zur 4. Potenz der Kernladungszahl Z anwächst und mit der sechsten Potenz der Hauptquantenzahl n kleiner wird.

Der Beitrag der Spin-Bahn-Kopplung zur potentiellen Energie nimmt folglich schnell mit den Wert der Hauptquantenzahl n ab.

Spin-Bahn-Kopplung 4

Kommentar 2

Umgekehrt wächst der Beitrag der Spin-Bahn-Kopplung schnell mit der Kernladungszahl Z an.

Obwohl die Kernladung für Valenzelektronen durch die übrigen Elektronen eines Atoms gut abgeschirmt wird, und ein Anstieg der Spin-Bahn-Energie proportional zu Z^4 übertrieben ist, zeigt es sich, dass für Atome, deren Kernladungszahl größer als $Z = 50$ ist, die Spin-Bahn-Kopplung der dominierende Beitrag zur Energie der Elektronen ist.

Addition von Drehimpulsen

Atome

Die Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms

- Die Schrödinger Gleichung
- Das Kastenpotential
- Bahndrehimpuls
- Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom
- normaler Zeeman Effekt
- Das Stern-Gerlach Experiment und der Spin des Elektrons
- Spin-Bahn-Kopplung
- Addition von Drehimpulsen

Addition von Drehimpulsen 1

Drehmoment $\vec{\tau}$ auf ein magnetisches Moment $\vec{\mu}$ in einem magnetischen Feld $\vec{B}$

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$

Wirkt ein Drehmoment auf einen Drehimpuls kommt es zu einer Präzessionsbewegung

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\tau} \quad \text{und} \quad \frac{d\vec{S}}{dt} = \vec{\tau}$$

Beispiele aus der Mechanik ([Kreisel.mp4](#) und [Präzession.mp4](#))

$$L_z \neq 0$$



$$L_z \approx 0$$



Addition von Drehimpulsen 1

Kommentar 1

Die Spin-Bahn-Kopplung beruht darauf, dass die magnetischen Momente der Bahn und des Elektrons sich gegenseitig beeinflussen.

Befindet sich ein magnetisches Moment in einem Magnetfeld, dann wirkt ein Drehmoment auf das magnetische Moment, denn das Minimum der potentiellen Energie ist erst erreicht, wenn das magnetische Moment parallel zum Magnetfeld ausgerichtet ist.

Die erste rot umrandete Formel gibt das Drehmoment für ein magnetisches Moment μ im magnetischen Feld B .

Das Drehmoment steht senkrecht auf der Ebene, die vom magnetischen Moment und dem Magnetfeld aufgespannt wird.

In der Mechanik wird das Drehmoment gemäß der Formel $\vec{\tau} = \vec{r} \times \vec{F}$ berechnet.

Addition von Drehimpulsen 1

Kommentar 2

Der Ortsvektor zeigt dabei vom Auflagepunkt zum Angriffspunkt der Kraft, z.B. zum Schwerpunkt eines Körpers auf den die Gewichtskraft wirkt.

Rotiert der Körper, d.h. besitzt er einen Drehimpuls, dann bewirkt das Drehmoment, dass der Körper eine Präzessionsbewegung ausführt.

Die Änderung des Drehimpulses mit der Zeit ist durch das Drehmoment bestimmt.

Die zweiten rot umrandeten Formeln gegeben die Änderung des Bahndrehimpulses und des Spin mit der Zeit unter dem Einfluss eines Drehmoments.

Die beiden folgenden Videos zeigen die Präzession mechanischer Körper unter dem Einfluss der Gewichtskraft.

Addition von Drehimpulsen 1

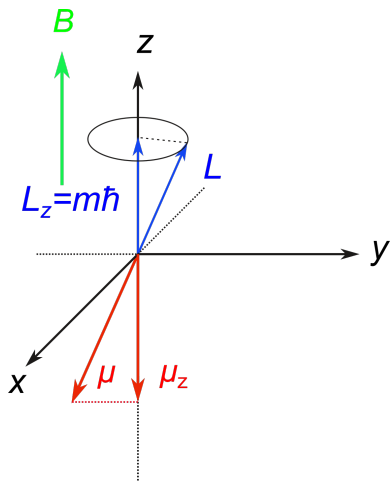
Kommentar 3

Die z-Richtung wird dabei durch die Richtung der Erdanziehungskraft definiert.

Das erste Video zeigt die Präzession, wenn die z-Komponente des Drehimpulses stark von Null abweicht.

Das zweite Video zeigt die Präzession, wenn die z-Komponente des Drehimpulses nahe bei Null liegt.

Addition von Drehimpulsen 2



magnetisches Moment und Bahndrehimpuls

$$\vec{\mu}_L = -\mu_B \frac{\vec{L}}{\hbar}$$

magnetisches Eigenmoment und Spin des Elektrons

$$\vec{\mu}_s = -g\mu_B \frac{\vec{s}}{\hbar}$$

Präzessionsfrequenz

$$\omega_p = \frac{g\mu_B B}{\hbar}$$

Addition von Drehimpulsen 2

Kommentar 1

Die Abbildung skizziert die Situation für einen quantisierten Drehimpuls.

Das magnetische Moment ist fest mit dem Drehimpuls verknüpft.

Die erste rot umrandete Formel gibt das magnetische Moment für den Bahndrehimpuls und die zweite rot umrandete Formel das magnetische Moment für den Spin des Elektrons.

Wird durch ein äußeres Magnetfeld eine Quantisierungsrichtung definiert, dann kann ein quantisierter Drehimpuls sich niemals parallel zu dieser Richtung einstellen.

Addition von Drehimpulsen 2

Kommentar 2

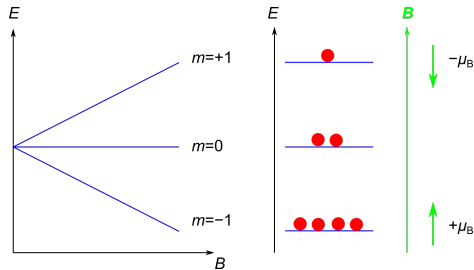
Folglich wirkt immer ein Drehmoment und der Drehimpuls präzediert um die Richtung des Magnetfelds.

Die Frequenz der Präzession ist unabhängig vom Auslenkwinkel und durch die rot unterstrichene Formel gegeben. Für den Spin des Elektrons hat der g-Faktor in guter Näherung den Wert 2. Für den Bahndrehimpuls hat der g-Faktor den Wert 1.

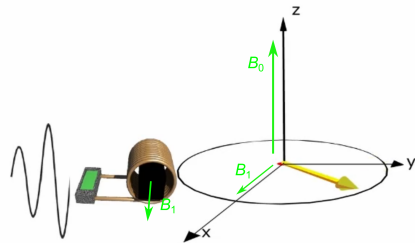
Im thermischen Gleichgewicht kann die Präzession nicht beobachtet werden, da die völlig unbestimmte Bewegung des Drehimpulses aufgrund der Unschärferelation für den Drehimpuls hinzukommt.

Addition von Drehimpulsen 3: Beobachtung der Präzession

paramagnetisches Moment im
thermischen Gleichgewicht



magnetische Resonanz



(FreeInductionDecay.mp4)

Addition von Drehimpulsen 3

Kommentar 1

Die linke Abbildung zeigt die Situation, wenn sich ein Ensemble paramagnetischer Momente (d.h. die magnetische Wechselwirkung zwischen den Momenten ist vernachlässigbar klein) in einem statischen Magnetfeld befindet.

Die Energieniveaus sind im magnetischen Feld aufgespalten und im thermischen Gleichgewicht gemäß dem Boltzmann-Faktor besetzt.

Die Komponenten der magnetischen Momente entlang der Feldrichtung addieren sich zu einem gesamten magnetischen Moment, während sich die transversalen Komponenten senkrecht zum Magnetfeld zu Null mitteln.

Die Abbildung auf der rechten Seite zeigt, wie die Präzessionsbewegung der magnetischen Momente sichtbar gemacht werden kann.

Dazu muss das thermische Gleichgewicht gestört werden.

Addition von Drehimpulsen 3

Kommentar 2

In der Animation wird das durch eine Welle angedeutet, die eingestrahlt wird und deren Frequenz mit der Präzessionsfrequenz der magnetischen Momente übereinstimmen muss.

Das magnetische Feld der Welle dreht das magnetische Moment senkrecht zur Richtung des statischen Magnetfelds.

Das präzedierende magnetische Moment induziert in der Spule eine Spannung, die gemessen werden kann.

Der Vorgang wird magnetische Resonanz genannt, da die Frequenz der Anregung mit der Präzessionsfrequenz genau übereinstimmen muss.

Die Wechselwirkung der quantisierten magnetischen Momente untereinander bewirkt, dass das Ensemble der quantisierten magnetische Momente wieder in das thermische Gleichgewicht relaxiert.

Addition von Drehimpulsen 3

Kommentar 3

Dabei werden zwei Relaxationszeiten unterschieden: die longitudinale Relaxationszeit T_1 und die transversale Relaxationszeit T_2 .

Da die magnetischen Momente zur longitudinalen Relaxation Energie abgeben müssen, ist üblicherweise T_1 sehr viel länger als T_2 .

Die Animation deutet die Relaxation an, wobei der Unterschied zwischen T_1 und T_2 unterschlagen wird.

Addition von Drehimpulsen 4

Spin-Bahn-Kopplung

$$\hat{H}_{SL} = \xi \frac{\hat{\vec{s}} \cdot \hat{\vec{L}}}{\hbar^2}$$

$$\frac{d\vec{s}}{dt} = \vec{\mu}_s \times \vec{B}_L \quad \text{und} \quad \frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\mu}_L \times \vec{B}_s$$

L_z und s_z haben keine Eigenwerte mehr

Drehimpulserhaltung

Interne Drehmomente ändern den Gesamtdrehimpuls
nicht!



(Drehimpulserhaltung.mp4)

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Addition von Drehimpulsen 4

Kommentar 1

Die rot umrandete Formel zeigt den Hamiltonoperator der Spin-Bahn-Kopplung.

Aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung erfährt der Spin ein Drehmoment, das vom Magnetfeld der Bahnbewegung verursacht wird.

Der Bahndrehimpuls wiederum erfährt ein Drehmoment, das vom Magnetfeld des Spins herrührt.

Sowohl das Magnetfeld der Bahn und des Spins ändert sich ständig, so dass mittels dieser Magnetfelder keine Quantisierungsrichtungen definiert werden können.

Es zeigt sich, dass es für Bahndrehimpuls und Spin keine Quantisierungsrichtung mehr gibt.

Addition von Drehimpulsen 4

Kommentar 2

Aus der klassischen Mechanik ist bekannt, dass interne Drehmomente den Gesamtdrehimpuls nicht verändern können.

Das Video zeigt diesen Effekt für den vertikalen Drehimpuls.

Zu Beginn des Experiments ist der Drehschemel in Ruhe und der Drehimpuls des Rades liegt in der horizontalen Ebene.

Wird das rotierende Rad gedreht, so dass der Drehimpuls in die vertikale Richtung zeigt, dann wird dieser Drehimpuls durch eine entsprechend gegenläufige Drehbewegung des Schemels kompensiert.

Wird die Radachse um 180° gedreht, dann dreht der Schemel in die entgegengesetzte Richtung.

Addition von Drehimpulsen 4

Kommentar 3

Der Gesamtdrehimpuls in vertikaler Richtung ist stets Null.

Für die übrigen Komponenten des Drehimpulses muss der Drehimpuls der Erde berücksichtigt werden. Dieser ist jedoch derart groß, dass kein Effekt beobachtet werden kann, wenn die Rotationsachse des Rades verändert wird.

Die folgende rot umrandete Formel gibt die Addition von Bahndrehimpuls und Spin zum Gesamtdrehimpuls.

Der Gesamtdrehimpuls aus Bahn und Spin wird üblicherweise mit dem Buchstaben J bezeichnet.

Addition von Drehimpulsen 4

Kommentar 4

Obwohl aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung nun überhaupt keine Komponente von $\vec{L}$ und $\vec{S}$ festgelegt werden kann, verlieren der Bahndrehimpuls und Spin nicht ihre Bedeutung.

Die Länge dieser Vektoren $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ und $\hbar\sqrt{s(s+1)}$ ist weiterhin definiert!

Addition von Drehimpulsen 5

Die Eigenwertgleichungen für den Gesamtdrehimpuls sind

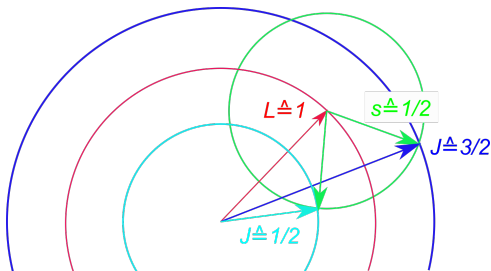
$$\begin{aligned}\hat{J}^2 |j, m_j\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |j, m_j\rangle \\ \hat{J}_z |j, m_j\rangle &= m_j\hbar |j, m_j\rangle\end{aligned}$$

Die Quantenzahl j hat die Werte

$$j = |\ell - s|, |\ell - s| + 1, \dots, \ell + s$$

und die Quantenzahl m_j

$$m_j = -j, -j + 1, \dots, +j - 1, +j$$



Addition von Drehimpulsen 5

Kommentar 1

Der Gesamtdrehimpuls unterliegt der Quantenphysik und muss wie alle Drehimpulse der Quantenphysik die charakteristischen Eigenwertgleichungen erfüllen.

Die rot umrandeten Formeln geben die Eigenwertgleichungen für den Gesamtdrehimpuls.

Da die Eigenzustände sich aus den Kugelflächenfunktionen des Bahndrehimpulses und den Zahlentupeln des Spins zusammensetzen, wird die Dirac-Notation verwendet, um die Eigenzustände anzuzeigen.

Alle mathematischen Details der Eigenfunktionen verbergen sich im Diracschen Ket-Symbol für den Gesamtdrehimpuls und werden im Rahmen dieser Vorlesung nicht benötigt.

Addition von Drehimpulsen 5

Kommentar 2

Wichtig ist die Aussage der Eigenwertgleichungen.

Beim Gesamtdrehimpuls handelt es sich um einen Vektor mit der Länge $\hbar\sqrt{j(j+1)}$ und der Projektion $m_j\hbar$ auf die z-Achse.

Die Vektoren von Bahndrehimpuls und Spin können wie normale Vektoren zum Gesamtdrehimpuls addiert werden.

Die Abbildung zeigt die Addition von einem Spin zu einem Bahndrehimpuls mit der Quantenzahl $\ell = 1$.

Der Radius des roten Kreises entspricht der Länge des Bahndrehimpulsvektors $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)} = \hbar\sqrt{2}$ und der Radius des grünen Kreises der Länge des Spinvektors $\hbar\sqrt{s(s+1)} = \hbar\sqrt{\frac{3}{4}}$. Der dunkelblaue Kreis entspricht einer Drehimpulslänge zur Quantenzahl $j = 3/2$.

Addition von Drehimpulsen 5

Kommentar 3

Der hellblaue Kreis entspricht einer Drehimpulslänge zur Quantenzahl $j = 1/2$.

Die Addition der Drehimpulse mit der Quantenzahl $\ell = 1$ und $s = 1/2$ ergibt sich aus den Schnittpunkten des grünen Kreises mit dem dunkelblauen und hellblauen Kreisen.

Das entspricht den Gesamtdrehimpulsen mit den Quantenzahlen $j = 1/2$ und $j = 3/2$.

Die Orientierung des Gesamtdrehimpulses ist zunächst gleichgültig, weshalb nur auf zwei der Schnittpunkte Vektorpfeile deuten.

Die Orientierung des Gesamtdrehimpulsvektors wird erst eingeschränkt, wenn eine Quantisierungsrichtung gewählt wird und damit die z-Komponente einen Eigenwert erhält.

Addition von Drehimpulsen 5

Kommentar 4

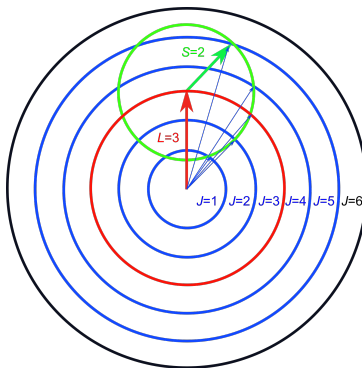
Schnittpunkte mit dem roten Kreis gibt es nicht, denn die Gesamtdrehimpulsquantenzahl j variiert in Einser-Schritten zwischen $|\ell - s|$ und $\ell + s$.

Ebenso variiert die Quantenzahl m_j in Einser-Schritten zwischen $-j$ und $+j$.

Die beiden unteren rot umrandeten Formeln geben die allgemeinen Regeln für die Quantenzahlen j und m_j bei der Addition von Bahndrehimpuls und Spin.

Addition von Drehimpulsen 6

Addition von Bahndrehimpuls mit $L = 3$ und Spin mit $S = 2$



$$|L - S| \leq J \leq L + S$$

Addition von Drehimpulsen 6

Kommentar 1

Bei Atomen mit mehreren Elektronen addieren sich die Spins der Elektronen und die Spinquantenzahl kann größer als $1/2$ sein.

Die Drehimpulsquantenzahlen werden üblicherweise mit großen Buchstaben gekennzeichnet, wenn es sich um Elektronenkonfigurationen mit mehreren Elektronen handelt.

Die Abbildung zeigt als Beispiel die Addition von einem Bahndrehimpuls mit der Quantenzahl $L = 3$ und einem Spin mit der Quantenzahl $S = 2$.

Es kann sich dabei z.B. um eine Elektronenkonfiguration mit 4 Elektronen handeln.

Die Radien der Kreise entsprechen der Länge der Drehimpulsvektoren.

Addition von Drehimpulsen 6

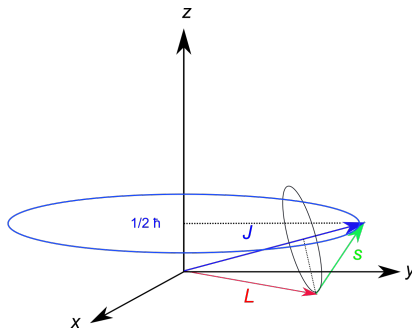
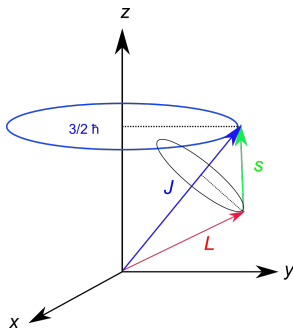
Kommentar 2

Die Abbildung veranschaulicht, dass bei dieser Addition der Gesamtdrehimpuls die Quantenzahlen $J = 1, 2, 3, 4$ und 5 annehmen kann.

Die rot umrandete Formel gibt die allgemeine Bedingung für die Gesamtdrehimpulsquantenzahl, wenn zwei Drehimpulse addiert werden.

Addition von Drehimpulsen 7

Addition der Drehimpulse $\ell = 1$ und $s = 1/2$ zu
 $j = 3/2$ und $m_j = 3/2$ bzw. $m_j = 1/2$



Addition von Drehimpulsen 7

Kommentar 1

Die Abbildungen zeigen nochmals die Addition der Drehimpulse für den Fall, dass der Bahndrehimpuls $\ell = 1$ und der Spin $s = 1/2$ zu einem Gesamtdrehimpuls $j = 3/2$ addiert werden.

Nun ist durch die z-Achse eine Quantisierungsrichtung definiert.

Der Gesamtdrehimpulsvektor liegt auf einer Kegelfläche, die durch den Eigenwert für J_z bestimmt ist.

Die Abbildungen zeigen den Fall, dass der Eigenwert der z-Komponente den Wert $+3/2 \hbar$ bzw. $+1/2 \hbar$ hat.

Addition von Drehimpulsen 7

Kommentar 2

Da die internen Magnetfelder die magnetischen Momente der Bahn und des Spins koppeln, führt der Bahndrehimpuls und der Spin eine nicht definierte Quantenbewegung um den Gesamtdrehimpulsvektor aus, was durch die schwarzen Ellipsen angedeutet wird.

Der Gesamtdrehimpuls übernimmt für den Bahndrehimpuls und den Spin jedoch nicht die Rolle einer Quantisierungsrichtung, wie es die Abbildung suggerieren könnte.

Nur die Länge des Bahndrehimpulsvektors und die Länge des Spinvektors ist definiert.

Die Vektorkomponenten von $\vec{L}$ und $\vec{S}$ bleiben hingegen vollständig unbestimmt.

Addition von Drehimpulsen 8

Die Orbitale des Wasserstoffatoms werden auf die folgende Weise bezeichnet

$$n^{2s+1}\ell_j$$

Das erste angeregte p-Orbital von Wasserstoff ist

$$\underline{2^2p_{\frac{1}{2}}} \quad \text{und} \quad 2^2p_{\frac{3}{2}}$$

Aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung ist

$$E(2^2p_{\frac{1}{2}}) < E(2^2p_{\frac{3}{2}})$$

Addition von Drehimpulsen 8

Kommentar 1

Ein Orbital des Wasserstoffatoms ist durch die Angabe der Hauptquantenzahl n , der Bahndrehimpulsquantenzahl ℓ und der Gesamtdrehimpulsquantenzahl j vollständig charakterisiert.

Die rot umrandete Formel gibt die Notation.

Der hochgestellte Index $2s + 1$ wird Multiplizität des Orbitals genannt.

Im Fall der Wasserstofforbitale ergibt $2s + 1$ immer den Wert zwei.

Die Wasserstofforbitale sind aufgrund der Spinquantenzahl sogenannte Dubletts.

Die rot unterstrichene Zeile gibt die Notation für das erste angeregte p-Orbital des Wasserstoffatoms.

Addition von Drehimpulsen 8

Kommentar 2

Die Spin-Bahnkopplung führt dazu, dass der Zustand mit der kleineren Gesamtdrehimpulsquantenzahl $j = 1/2$ besser gebunden ist, als der Zustand mit der Gesamtdrehimpulsquanten $j = 3/2$.

Der Energieeigenwert der Spin-Bahn-Kopplung zu $j = 1/2$ hat somit einen kleineren Wert als der Energieeigenwert zur Quantenzahl $j = 3/2$.

Addition von Drehimpulsen 9

Hamiltonoperator der Spin-Bahn-Kopplung

$$\hat{H}_{sL} = \xi \frac{\hat{\vec{s}} \cdot \hat{\vec{L}}}{\hbar^2}$$

Mit

$$\vec{J}^2 = (\vec{L} + \vec{s})^2 = \vec{L}^2 + \vec{s}^2 + 2\vec{s}\vec{L} \quad \rightarrow \quad \vec{s}\vec{L} = \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{s}^2)$$

ist

$$\hat{\vec{s}} \cdot \hat{\vec{L}} |\ell, s, j, m_j\rangle = \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)) |\ell, s, j, m_j\rangle$$

und die Eigenwerte von $\hat{H}_{sL}$ sind

$$E_{j,\ell,s} = \frac{\xi}{2} (j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1))$$

Addition von Drehimpulsen 9

Kommentar

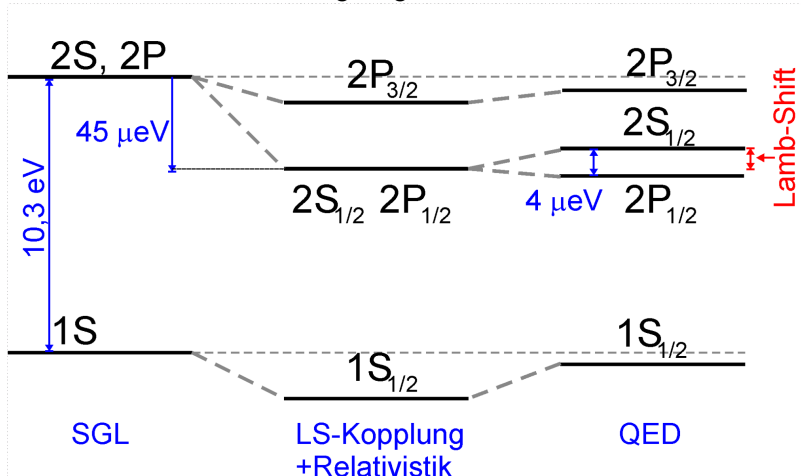
Die Energieeigenwerte für den Hamiltonoperator der Spin-Bahn-Kopplung können nun angegeben werden.

Mit der rot unterstrichenen Formel für das Quadrat des Gesamtdrehimpulsvektors können die Eigenwerte für das Skalarprodukt von Spin und Bahndrehimpuls durch die bekannten Eigenwerte für die Quadrate der Drehimpulse ausgedrückt werden.

Die rot umrandete Formel gibt die Energieeigenwerte für den Hamiltonoperator der Spin-Bahn-Kopplung an.

Addition von Drehimpulsen 10

Grundzustand und erste angeregte Orbitale des Wasserstoffatoms



Addition von Drehimpulsen 9

Kommentar 1

Die Abbildung zeigt den Grundzustand und die ersten angeregten Orbitale des Wasserstoffatoms mit der Hauptquantenzahl $n = 2$.

Das linke Energieniveauschema gibt das Ergebnis eines Experiments, wenn die spektrale Auflösung nicht ausreicht, um die sogenannte Feinstruktur der ersten angeregten Zustände aufzulösen.

Diese Energieniveaus ergeben sich mit der Schrödingergleichung, wenn zur kinetischen Energie nur die potentielle Energie aufgrund der Anziehungskraft zwischen dem Atomkern und dem Elektron addiert wird.

Das mittlere Energieniveauschema gibt das Ergebnis der relativistischen Schrödingergleichung von Dirac.

Addition von Drehimpulsen 10

Kommentar 2

Um die Aufspaltung aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung auflösen zu können, wird eine spektrale Auflösung von besser als $5 \cdot 10^{-4}$ nm benötigt.

Diese Auflösung wurde zum Beginn des 20. Jahrhunderts erreicht.

Die Dirac-Theorie von 1927 stimmt mit der experimentell bestimmten Feinstrukturaufspaltung überein.

Eine besonderes Ergebnis der Dirac-Theorie ist, dass sich für das $2s_{1/2}$ -Orbital der gleiche Energieeigenwert wie für das $2p_{1/2}$ -Orbital ergibt.

Die experimentelle Herausforderung bestand nun darin, die Auflösung der Experimente soweit zu steigern, dass auch diese Vorhersage der Dirac-Theorie experimentell überprüft werden konnte.

Addition von Drehimpulsen 10

Kommentar 3

1947 gelang es Lamb und Rehderford, die Auflösung durch die Kombination von Mikrowellen und Lichtwellen um Größenordnungen zu steigern.

Ihre Experimente ergaben, dass es einen kleinen Energieunterschied zwischen dem $2p_{1/2}$ -Orbital und dem $2s_{1/2}$ -Orbital gibt.

Dieser Energieunterschied wird nach ihrem Entdecker Lamb-shift genannt.

Willis Eugene Lamb wurde für diese Experimente 1955 mit dem Nobelpreis für Physik ausgezeichnet.

Damit war experimentell gezeigt, dass auch für das Elektron die Dirac-Theorie nicht vollständig ist, da sie die Fluktuationen vernachlässigt, die durch die Unschärferelation möglich sind.

Addition von Drehimpulsen 10

Kommentar 4

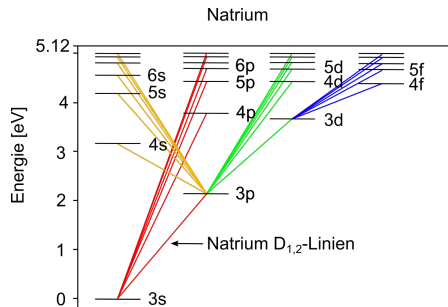
Die Lamb-shift wurde neben dem g-Faktor des Elektrons zu einem Prüfstein der Quantenelektrodynamik, mit der der Einfluss dieser Fluktuationen im Rahmen einer Störungsrechnung bestimmt werden kann.

Addition von Drehimpulsen 11

Aufspaltung der Natrium D-Linie (Kernladungszahl von Natrium: $Z = 11$)

$$D_1 : 3^2s_{1/2} \rightarrow 3^2p_{1/2} \quad (\lambda = 589.5924 \text{ nm})$$

$$D_2 : 3^2s_{1/2} \rightarrow 3^2p_{3/2} \quad (\lambda = 588.9951 \text{ nm})$$



$$\Delta E = E(3^2p_{3/2}) - E(3^2p_{1/2}) \approx 2 \text{ meV}$$

Addition von Drehimpulsen 11

Kommentar 1

Die rechte Abbildung zeigt die Aufspaltung der gelben Natrium-Linie, die ich in der zweiten Vorlesung zur Demonstration des Auflösungsvermögens eines Fabry-Perot-Interferometers gezeigt habe.

Die linke Abbildung zeigt das Energieniveauschema von Natrium. Die Kernladungszahl des Natriumatoms beträgt $Z = 11$.

10 der Elektronen ergeben die stabile Edelgaskonfiguration des Neon-Atoms.

Das 11-te Elektron befindet sich in einem 3s-Orbital.

Die Natrium D-Linie ergibt sich aus dem Übergang zwischen dem 3s-Orbital im Grundzustand und dem angeregten 3p-Orbital, das durch die Spin-Bahn-Kopplung in zwei Komponenten aufgespalten ist.

Addition von Drehimpulsen 11

Kommentar 2

Die Natrium D_1 Linie entspricht dem Übergang zwischen dem $3s_{1/2}$ Orbital und dem $3p_{1/2}$ Orbital.

Die Wellenlänge des Übergangs beträgt 589,5923 nm.

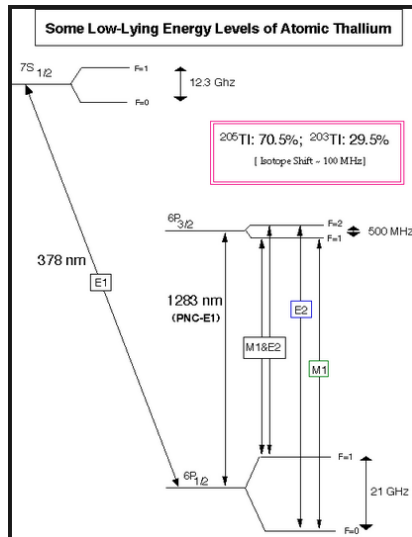
Die Natrium D_2 Linie entspricht dem Übergang zwischen dem $3s_{1/2}$ Orbital und dem $3p_{3/2}$ Orbital.

Die Wellenlänge des Übergangs beträgt 588,9951 nm.

Aus der Wellenlängendifferenz ergibt sich eine Energiedifferenz zwischen dem $3p_{1/2}$ und dem $3p_{3/2}$ -Orbital von rund 2 meV.

Die Spin-Bahn-Kopplung beim Natriumatom ist damit rund 44-mal stärker als beim Wasserstoffatom.

Addition von Drehimpulsen 12



Thallium ($Z = 81$)

Feinstrukturaufspaltung des 6p
Orbitals $p_{1/2} \leftrightarrow p_{3/2}$

$$\Delta E_{p_{1/2} \leftrightarrow p_{3/2}} = \frac{hc}{\lambda} = 0,96 \text{ eV}$$

und $\lambda = 1283 \text{ nm}$

Addition von Drehimpulsen 12

Kommentar 1

Die Abbildung zeigt die Feinstruktur und auch die Hyperfeinstrukturaufspaltung einiger Energieniveaus von Thallium.

Die Kernladungszahl von Thallium ist $Z = 81$.

Thallium hat ein Valenzelektron, welches das $6p$ Orbital besetzt.

Die Feinstrukturaufspaltung aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung beträgt rund 1 eV.

Die Abbildung zeigt zudem die Aufspaltung der Energieniveaus aufgrund des magnetischen Moments des Atomkerns.

Der Atomkern von Thallium hat einen Kernspin mit der Quantenzahl $1/2$.

Der Drehimpuls des Valenzelektrons und der Kernspin addieren sich zum Gesamtspin, der mit dem Buchstaben F bezeichnet wird.

Addition von Drehimpulsen 12

Kommentar 2

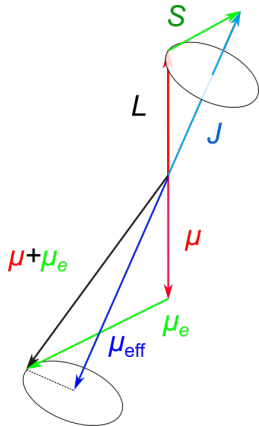
Die Hyperfeinstrukturaufspaltung funktioniert ähnlich zur Spin-Bahn-Kopplung.

Jedoch ist das magnetische Moment des Atomkerns rund einen Faktor 1000 kleiner als das magnetische Moment des Elektrons.

Die Hyperfeinaufspaltung von 21 GHz entspricht einer Energie von $87 \cdot 10^{-6}$ eV.

Der Grund dafür, dass die Hyperfeinstruktur nochmals einen Faktor 1000 kleiner ist, liegt darin, dass das 6p-Elektron sehr weit vom Atomkern entfernt ist und die Wechselwirkung der magnetischen Momente entsprechend schwach ist.

Addition von Drehimpulsen 13: Zeeman-Effekt



magnetisches Moment der Bahn

$$\underline{\vec{\mu} = -\mu_B \frac{\vec{L}}{\hbar}}$$

magnetisches Moment des Spins

$$\underline{\vec{\mu}_e = -g\mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar}}$$

effektives magnetisches Moment

$$\underline{\vec{\mu}_{eff} = -g_{j,\ell,s}\mu_B \frac{\vec{J}}{\hbar}}$$

Landé g-Faktor :

$$g_{j,\ell,s} = \frac{3}{2} - \frac{\ell(\ell+1) - s(s+1)}{2j(j+1)}$$

Addition von Drehimpulsen 13

Kommentar 1

Dass die bislang diskutierten Ideen zur Kopplung von Spin und Bahndrehimpuls richtig sind, zeigt auch das resultierende magnetische Moment, das sich durch die Addition ergibt.

Die Abbildung zeigt die Spin-Bahn-Kopplung mit den magnetischen Momenten von Spin und Bahndrehimpuls.

Die Drehimpulse von Bahn $\vec{L}$ und Spin $\vec{s}$ sind zum Gesamtdrehimpuls $\vec{J}$ gekoppelt.

Der Bahndrehimpuls und der Spin führen eine nicht genauer zu beschreibende Quantenbewegung um den Gesamtdrehimpuls aus.

Dabei bewegen sie sich auf Kegelflächen, die im oberen Teil der Skizze durch die schwarz gezeichnete Ellipse angedeutet wird.

Addition von Drehimpulsen 13

Kommentar 2

Die magnetischen Momente von Bahn und Spin müssen dieser Bewegung folgen.

Die ersten beiden rot unterstrichenen Formeln zeigen den Zusammenhang zwischen dem magnetischen Moment und dem Bahndrehimpuls bzw. dem Spin des Elektrons.

Da der g-Faktor des Elektrons rund den Wert 2 hat, ergibt es sich, dass die Summe der magnetischen Momente von Bahndrehimpuls und Spin nicht parallel zum Gesamtdrehimpuls $\vec{J}$ ausgerichtet ist.

In der Skizze ist das durch den schwarz gezeichneten Vektor für die Summe der magnetischen Momente von Bahn und Spin angedeutet.

Addition von Drehimpulsen 13

Kommentar 3

Da die magnetischen Momente von Bahn und Spin an die Quantenbewegung von $\vec{L}$ und $\vec{S}$ gebunden sind, mittelt sich der Anteil des magnetischen Gesamtmoments, der senkrecht zum Gesamtdrehimpuls $\vec{J}$ orientiert ist, zu Null.

Lediglich die Projektion des magnetischen Gesamtmoments auf den Gesamtdrehimpuls wird von der Quantenbewegung von $\vec{L}$ und $\vec{S}$ nicht beeinflusst.

Die dritte rot unterstrichene Formel gibt das effektive magnetische Moment.

Das effektive magnetische Moment ist parallel zum Gesamtdrehimpuls ausgerichtet.

Seine Größe wird vom Landé g-Faktor bestimmt, der aus der Geometrie der Vektoradditionen ausgerechnet werden kann. Die resultierende Formel ist rot umrandet angegeben.

Addition von Drehimpulsen 14: Zeeman-Effekt

Beispiele

$$\ell = 0$$

$$g_{j=s, \ell=0, s} = \frac{3}{2} - \frac{\ell(\ell+1) - s(s+1)}{2j(j+1)} = 2$$

$$s = 0$$

$$g_{j=\ell, \ell, s=0} = \frac{3}{2} - \frac{\ell(\ell+1) - s(s+1)}{2j(j+1)} = 1$$

Addition von Drehimpulsen 14

Kommentar

Diese Seite stellt zwei Zahlenbeispiele für den Landé g-Faktor zusammen.

Das erste Beispiel behandelt den Fall, dass die Quantenzahl für den Bahndrehimpuls Null ist.

Folglich ergibt sich der g-Faktor des Elektrons $g = 2$, da der Gesamtdrehimpuls J dem Spin des Elektrons entspricht.

Im zweiten Beispiel ist die Quantenzahl für den Spin Null.

Der Gesamtdrehimpuls stimmt mit dem Bahndrehimpuls überein und es ergibt sich für den Landé g-Faktor der Wert Eins.

Addition von Drehimpulsen 15: Zeeman-Effekt

Beispiele

p-Orbitale

$^2p_{1/2}$ -Orbital: $\ell = 1$, $s = 1/2$ und $j = 1/2$

$$g_{j=1/2, \ell=1, s=1/2} = \frac{3}{2} - \frac{\ell(\ell+1) - s(s+1)}{2j(j+1)} = \frac{2}{3}$$

$^2p_{3/2}$ -Orbital: $\ell = 1$, $s = 1/2$ und $j = 3/2$

$$g_{j=3/2, \ell=1, s=1/2} = \frac{3}{2} - \frac{\ell(\ell+1) - s(s+1)}{2j(j+1)} = \frac{4}{3}$$

Addition von Drehimpulsen 15

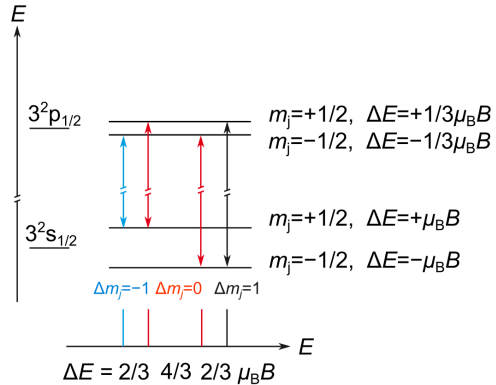
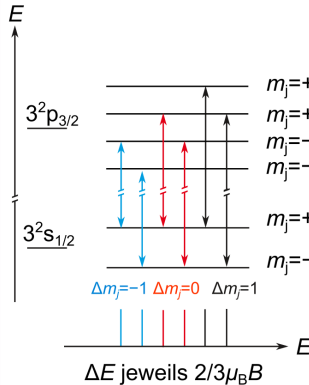
Kommentar

Für ein $p_{1/2}$ -Orbital ergibt sich mit der Gesamtdrehimpulsquantenzahl $j = 1/2$ für den Landé g-Faktor der Zahlenwert $2/3$.

Für ein $p_{3/2}$ -Orbital mit der Gesamtdrehimpulsquantenzahl $j = 3/2$ hat der Landé g-Faktor den Zahlenwert $4/3$.

Addition von Drehimpulsen 16: Zeeman-Effekt

Zeeman-Effekt der Natrium D-Linie



Addition von Drehimpulsen 16

Kommentar 1

Mit diesen g-Faktoren kann man sich Bild davon machen, welche Übergänge bei der Zeeman-Aufspaltung der Natrium D-Linie beobachtet werden können.

Die linke Abbildung zeigt den Übergang $3^2s_{1/2} \leftrightarrow 3^2p_{3/2}$ mit der Wellenlänge $\lambda = 588,9951 \text{ nm}$).

Die rechte Abbildung zeigt den Übergang $3^2s_{1/2} \leftrightarrow 3^2p_{1/2}$ mit der Wellenlänge $\lambda = 589,5924 \text{ nm}$).

Für den Grundzustand, der keinen Bahndrehimpuls hat, ist der g-Faktor 2.

Das Niveau mit der m_j -Quantenzahl $+1/2$ verschiebt sich um $+\mu_B \cdot B$ zu größeren Energien und das Niveau mit der m_j -Quantenzahl $-1/2$ verschiebt sich um $-\mu_B \cdot B$ zu kleineren Energien.

Addition von Drehimpulsen 16

Kommentar 2

Für das angeregte $3^2p_{1/2}$ Niveau mit dem g-Faktor $2/3$ beträgt die entsprechende Verschiebung der Energieniveaus im Magnetfeld nur $\pm \frac{1}{3}\mu_B \cdot B$, während die Verschiebungen für das $3^2p_{3/2}$ -Niveau $\Delta E = \pm \frac{2}{3}\mu_B \cdot B$ und $\pm 2\mu_B \cdot B$ betragen.

Damit ergeben sich mit der Auswahlregel $\Delta m_j = 0, \pm 1$ die gezeichneten Übergänge und die Aufspaltung der Spektrallinien im Magnetfeld.

Der Übergang $3^2s_{1/2} \leftrightarrow 3^2p_{3/2}$ wird in einem Magnetfeld in 6 Spektrallinien aufgespalten.

Die Spektrallinien haben alle den gleichen Abstand, der der Energiedifferenz $\Delta E = (2/3)\mu_B B$ entspricht.

Der Übergang $3^2s_{1/2} \leftrightarrow 3^2p_{1/2}$ wird in einem Magnetfeld in 4 Spektrallinien aufgespalten.

Addition von Drehimpulsen 16

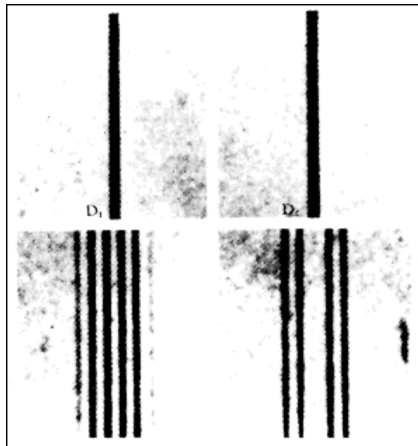
Kommentar 3

Es ergeben sich zwei Linienpaare, deren Energiedifferenz $\Delta E = (2/3)\mu_B B$ beträgt.

Die Energiedifferenz zwischen den Doppellinien beträgt $\Delta E = (4/3)\mu_B B$.

Addition von Drehimpulsen 17: Zeeman-Effekt

Pieter Zeeman (1896): Zeeman-Auspaltung der Natrium D Linien



Addition von Drehimpulsen 17

Kommentar

Die Abbildung zeigt nochmals die Messung von Pieter Zeeman der Aufspaltungen der Natrium D-Linien in einem Magnetfeld (Nobelpreis 1902).

Die Messung entspricht dem, was aufgrund der Addition der Drehimpulse erwartet werden kann.

Revision

Revision

1

1. Skizzieren Sie das Stern-Gerlach Experiment.
2. Was sollte mit dem Stern-Gerlach Experiment beobachtet werden?
3. Schreiben Sie die Eigenwertgleichungen für den Spin des Elektrons mit Hilfe der Dirac Notation auf.
4. Skizzieren Sie den Vektor für den Spin des Elektrons.
5. Wie lang ist der Vektors des Elektronenspins?
6. Wie hängt das magnetische Moment des Elektrons mit seinem Spin zusammen?
7. Wie kommt es zur „Spin-Bahn-Kopplung“ ?
8. Schreiben Sie den Hamiltonoperator der Spin-Bahn-Kopplung auf.
9. Wie lautet die Formel für das Drehmoment, das auf ein magnetisches Moment im Magnetfeld wirkt?
10. Was ist eine Präzessionsbewegung?

Revision

2

11. Weshalb addieren sich die Drehmomente der Elektronen eines Atoms zu einem Gesamtdrehimpuls?
12. Die Drehimpulse ℓ_1 und ℓ_2 zweier Elektronen werden zum Gesamtdrehimpuls L gekoppelt. Welche Zahlenwerte kann die Quantenzahl von $\hat{L}^2$ haben?
13. Wie lautet der Hamiltonoperator der Spin-Bahn-Kopplung?
14. Schreiben Sie seine Energieeigenwerte auf.
15. Berechnen Sie die Differenz benachbarter Energieniveaus, die aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung aufgespalten sind (Landé-Regel)
16. Berechnen Sie aus den Wellenlängen der Natrium D-Linien die Feinstrukturkonstante ξ des 3p-Orbitals ($\lambda_{D_1} = 589,5924$ nm und $\lambda_{D_2} = 588,9951$ nm).

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis

1. Vorlesung

- Eindimensionale Wellengleichung
- Reflexion und Transmission
- Stehende Wellen
- Dreidimensionale Wellen
- Schallwellen

2. Vorlesung

- Elektromagnetische Wellen
- Kohärenz
- Michelson Interferometer
- Interferenz an dünnen Schichten
- Beugung am Doppelspalt
- Beugung am Gitter

Inhaltsverzeichnis

3. Vorlesung

- Fabry-Perot Interferometer
- Beugung am Einzelspalt
- Bragg'sches Gesetz
- Laue Bedingung
- Michelson Morley Experiment

4. Vorlesung

- Die Einsteinschen Postulate
- Lorentz Transformation
- Zeitdilatation und Längenkontraktion
- Das Experiment von Hall und Rossi
- Zwillingsparadoxon
- „sichtbare Effekte“ der Lorentz Transformation
- Der invariante Abstand
- Relativistische Invarianten
- Doppler-Effekt
- Relativistische Mechanik

Inhaltsverzeichnis

5. Vorlesung

- Doppler-Effekt
- Relativistische Mechanik
- Wärmestrahlung

6. Vorlesung

- Plancksches Strahlungsgesetz
- Laser

7. Vorlesung

- Photoelektrischer Effekt
- Compton Effekt
- Materiewellen

8. Vorlesung

- Unschärferelationen
- Elektron und Elementarladung
- Kern und Elektronenwolke
- Das Spektrum des Wasserstoffatoms
- Das Bohrsche Atommodell

Inhaltsverzeichnis

9. Vorlesung

- Die Spektren der Alkalimetalle
- Die Spektren der Röntgenstrahlung
- Das Frank-Hertz Experiment
- Die Schrödinger Gleichung
- Das Kastenpotential
- Bahndrehimpuls

10. Vorlesung

- Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom
- normaler Zeeman Effekt