

Vorlesung 12+13:

Roter Faden:

Wiederholung H-Atom

Bahnmagnetismus (Zeeman-Effekt)

Spinmagnetismus (Stern-Gerlach-Exp.)

Landé-Faktor (Einstein-deHaas Effekt)

Spin-Bahn Kopplung (Vektormodell $J=L+S$)

Lamb-Retherford Verschiebung

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Siehe auch: Demtröder, Experimentalphysik 3, Springerverlag

Und http://www.ipf.uni-stuttgart.de/lehre/online-skript/f30_11.html

Quantummechanisches Modell des H-Atoms

Die Schrödinger-Gleichung des Wasserstoffatoms

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} \right\} \psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right) \psi = 0$$

Atomkern

- ▶ Punktförmige Masse von $m=\infty$
- ▶ Ladung e

Elektron

- ▶ Masse m_e
- ▶ Potential

$$V(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

Berechnung in Kugelkoordinaten $\Rightarrow$ und dem Produktansatz:

$$\psi(\vec{r}) = R(r)P(\theta)F(\varphi)$$

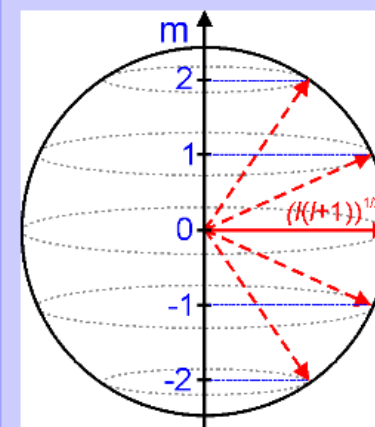
Dadurch lässt sich DGL in Summanden zerlegen, die nur von einer Koordinaten abhängen und damit jeweils konstant sein müssen.

Die resultierenden Wellenfunktionen:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)P_l^m(\theta) \exp(im\varphi)$$

Mit den Quantenzahlen:

Hauptquantenzahl:	$n=1,2,3,\dots$
Drehimpulsquantenzahl:	$0 \leq l \leq n-1$
Magnetische Quantenzahl	$-l \leq m \leq l$



Ein Zustand mit der Drehimpulsquantenzahl $l=2$ hat 5 Möglichkeiten für die magnetische Quantenzahl. Es ist immer $L^2 > (m\hbar)^2$, denn für $m\hbar = |L|$ wäre $L_x = L_y = 0$, und damit scharf messbar.

Winkelabhängigkeit der Wellenfkt.

Lösung für den **Azimut** sind Eigenfunktionen des Operators L_z , der die z-Komponente des Drehimpulses misst:

$$\hat{L}_z^2 F = -\hbar^2 \frac{d^2 F}{d\varphi^2} = \hbar^2 m^2 F$$

$$F(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi)$$

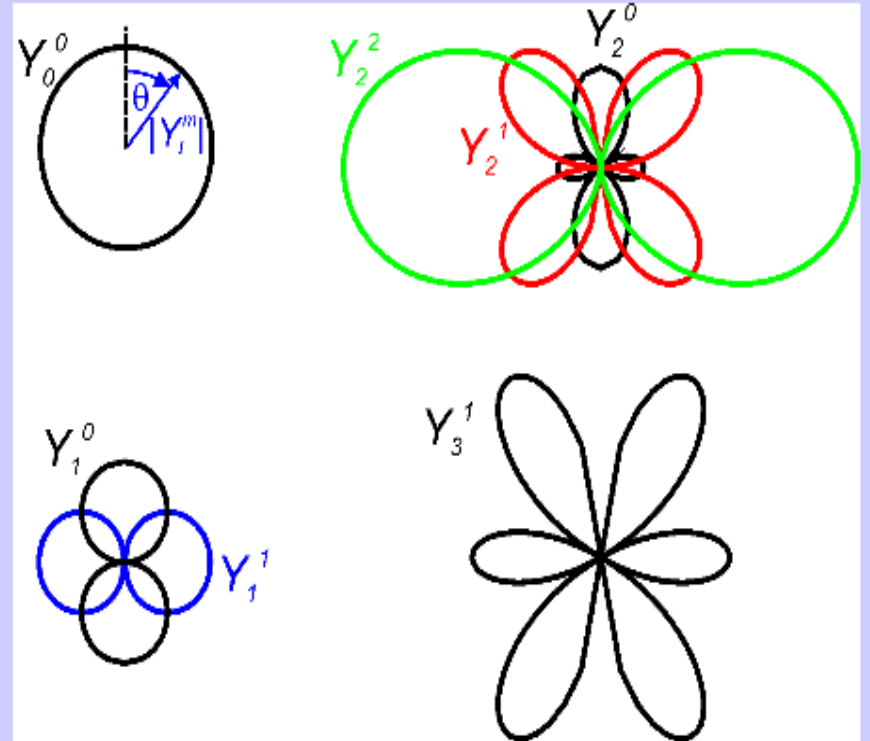
Die Abhängigkeit vom **Poloidalwinkel** ist durch Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators L^2 gegeben:

$$\left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \sin \theta \frac{d}{d\theta} + \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) P = l(l+1)P$$

Die Winkelabhängigkeit insgesamt folgt den **Kugelflächenfunktionen**

$$Y_l^m(\theta, \varphi) \sim P_l^m(\theta) \exp(im\varphi)$$

Die Winkelabhängigkeit einiger Zustände



Dargestellt ist der Betrag einiger Kugelflächenfunktionen in der x-z-Ebene. In die Richtung der Ausstülpungen ist die Wahrscheinlichkeit am höchsten, ein Elektron zu finden. [IDL-Programm](#)

Radiale Abhängigkeit der Wellenfkt.

Die Differentialgleichung

$$\left(\frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} (E - V(r)) \right) R = l(l+1)R$$

hat die Lösung

$$R_{nl}(r) = N_{nl} \exp(-\kappa_n r) r^l L_{n+l}^{2l+1}(2\kappa_n r)$$

mit der Normierungskonstanten N_{nl} und den

Laguerre-Polynomen $L_n^l(r)$ sowie

$$\kappa_n^2 = -\frac{2m_e}{\hbar^2} E_n$$

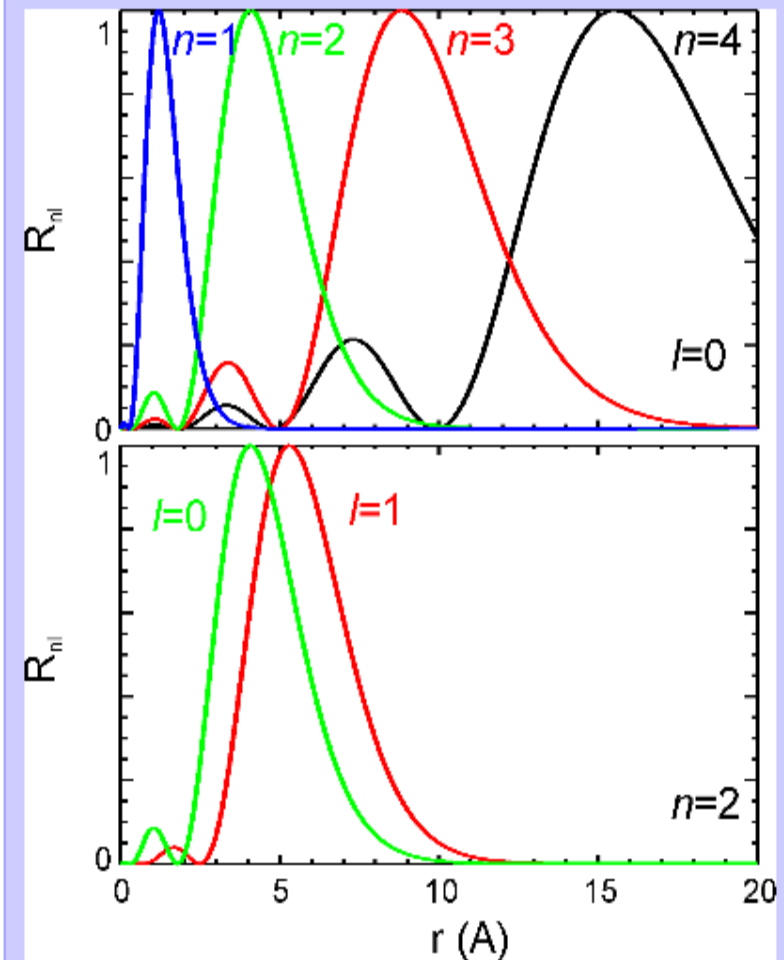
Beispiele:

$$R_{10} = N \exp(-\kappa_1 r)$$

$$R_{20} = N \exp(-\kappa_2 r) (1 - 2\kappa_2 r)$$

$$R_{21} = N \exp(-\kappa_2 r) 2\kappa_2 r$$

Aufenthaltswahrscheinlichkeiten



Berechnet aus $r^2 R_{nl}^2$ und das Maximum auf 1 normiert (IDL-Programm).
Mit steigendem n entfernt sich das Elektron vom Atomkern.

Energieniveaus

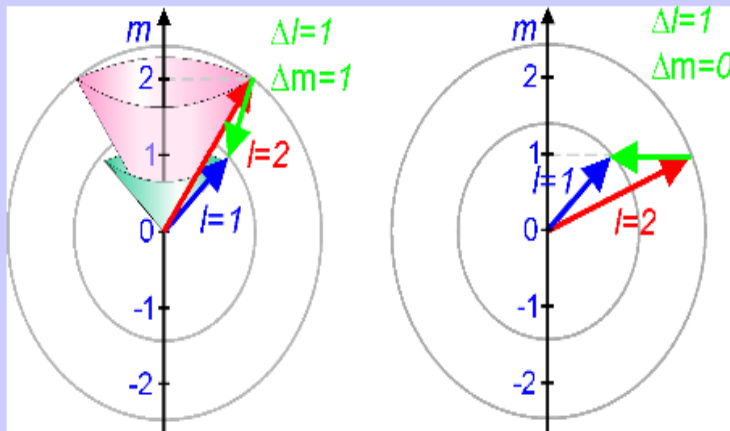
Spektroskopische Nomenklatur

<i>l</i>	0	1	2	3	4	5
Symbol	s	p	d	f	g	h
Entartung	1	3	5	7	9	11

Zu jedem Wert des Drehimpulses gibt es $2l+1$ Zustände gleicher Energie: Die Zustände sind $2l+1$ -fach entartet.

Übergänge unterliegen den Auswahlregeln

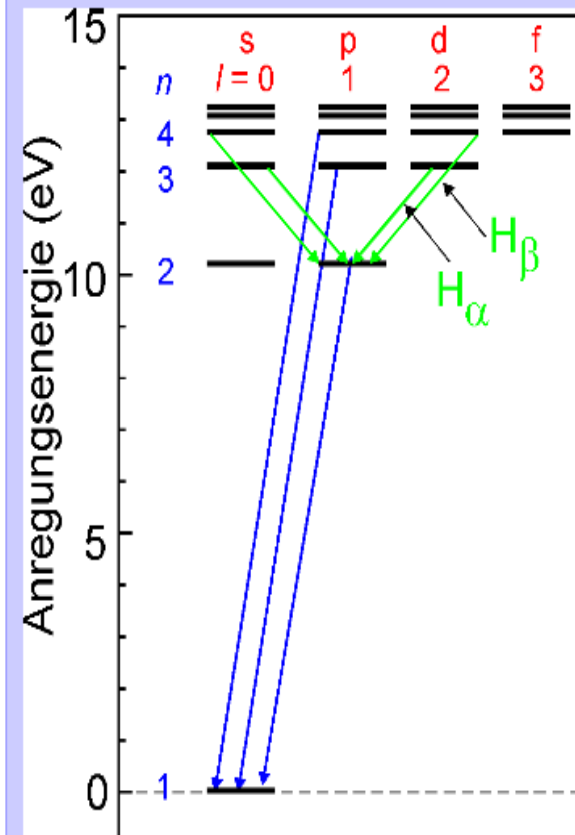
- ▶ $\Delta l = \pm 1$
- ▶ $\Delta m = 0, \pm 1$



Übergänge von $l=2$ nach $l=1$ mit $\Delta m=1$ (links) und $\Delta m=0$ (rechts).

Das Termschema des Wasserstoffatoms mit diskreten Energieeigenwerten:

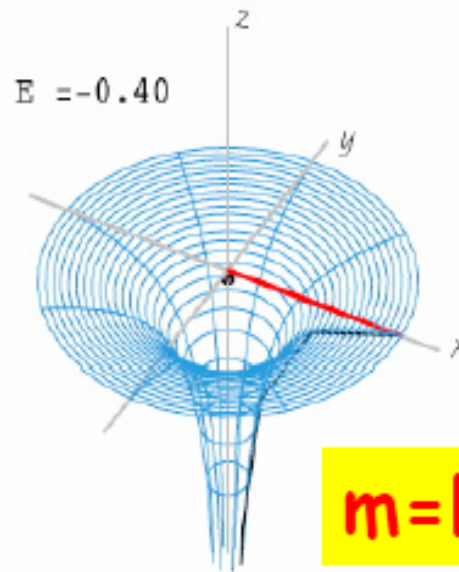
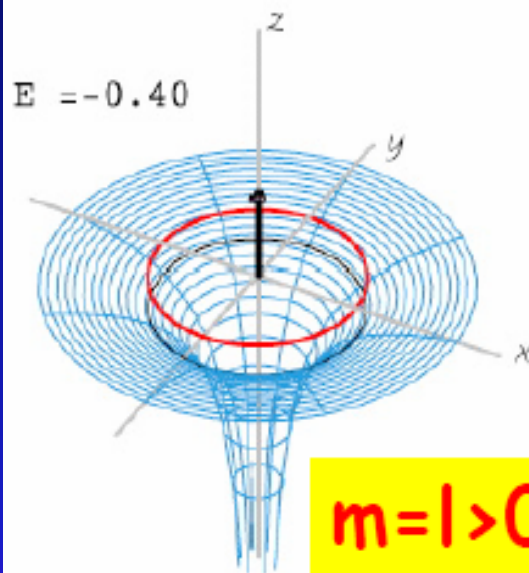
$$E_n = - \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$



Radiale Bahnen mit $l=0$

2.1. Classical Coulomb problem

4: Orbits with the same energy



Topics

- 1: Motion on a Kepler ellipse
- 2: Various orbits
- 3: Dependence on the coupling constant
- 4: Orbits with the same energy

Classical Coulomb problem – 4

1
(of 1)

Various orbits with the same energy

Interactive image showing a family of Coulomb orbits. You can adjust the angular momentum. The energy and the direction of the Runge-Lenz vector is fixed.

Theoretical background: This interactive image shows a set of Coulomb orbits with the same total energy. The energy has the negative value $E = -0.4$, corresponding to elliptic orbits. The total energy of the particle consists of the kinetic energy (which is always positive) and the potential energy (which is always negative in the case of an attractive Coulomb field). If you start closer to the center, the particle has a larger negative potential energy which can be compensated by a higher kinetic energy (i.e., by a larger initial momentum).

The shape of the orbit is determined by the distribution of energy between the radial and the angular motion. The orbits similar to a circle have a large amount of rotational energy (large angular momentum) and show almost no radial oscillations. The very excentric orbits put a high amount of energy in the radial oscillations, their motion has a small angular momentum and hence only a small rotational component.

2.1.4.1

Nomenklatur

Quantenzahlen - Buchstabennomenklatur.

z.B.: Zustand mit $n = 2, l = 1, m = 0 \Rightarrow 2p\sigma$ - Zustand

$n = 4, l = 3, m = 2 \Rightarrow 4f\delta$ - Zustand

Energie des Zustands hängt NUR von Hauptquantenzahl ab!

Es gibt daher zu jedem l wegen $-l \leq m \leq +l$ insgesamt $(2l + 1)$ energetisch gleiche Zustände $\rightarrow$ **entartete** Zustände

Wegen $l < n$ gibt es zu jeder Hauptquantenzahl n $k = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$

verschiedene Zustände (n, l, m) mit n^2 verschiedenen Wellenfunktionen $\Psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi) \rightarrow$ verschiedene räumliche Verteilung - z.B.: alle Zustände mit $l = 0$ haben kugelsymmetrische Wahrscheinlichkeitsverteilungen.

Diese Zustände haben ALLE selbe Energie $E_n \rightarrow k = n^2$

"Entartungsgrad"

Nomenklatur

Abkürzung zur vollständigen Bezeichnung eines Atomzustandes

$(n, l, m) \rightarrow \text{Termsymbol}$

$n^{2s+1}X_j$

X steht für S($l = 0$), P($l = 1$), D($l = 2$), F($l = 3$) und G($l = 4$)

linkere obere Index: **Multiplizität** ($2s + 1$)

gibt für $l \neq 0$ Zahl der Feinstrukturkomponenten

System mit nur einem Elektron: $s = 1/2$ $2s+1=2$

Rechte untere Index: Quantenzahl j mit $j = l + s$

Nomenklatur

$$\begin{array}{ccccccc}
 n = 3 & l = 0 & l = 1 & m = 0, \pm 1 & l = 2 & m = 0, \pm 1, \pm 2 \\
 n = 2 & l = 0 & l = 1 & m = 0, \pm 1 & & \\
 n = 1 & l = 0 & & & &
 \end{array}$$

l-Entartung wird aufgehoben, wenn

- 1) Potential nicht mehr die Form $\frac{1}{r}$ hat
- 2) durch relativistische Korrekturen

1)

m-Entartung [(2l+1) Niveaus] wird durch eine nicht-kugelsymmetrische Störung, wie zum Beispiel ein E -oder B-Feld in z-Richtung, aufgehoben.

Spektroskopische Notation: l = 0, 1, 2, 3 → Buchstaben s, p, d, f, wobei s = scharf; p = prinzipal; d = diffus; f = fundamental

Nachher: zusätzlich zum Bahndrehimpuls $\bar{l}$ gibt es den Eigendrehimpuls $\underline{s}$ (den Spin) des Elektrons

Notation: $n^{2s+1}L_j$

$L = \sum \bar{l}$, $\bar{s} = \sum \bar{s}$, $\bar{J} = \bar{L} + \bar{S}$ = Gesamtdrehimpuls, z.B. für Niveaus oben : $1^2s_{\frac{1}{2}}, 2^2p_{\frac{1}{2}}, 3^2d_{\frac{3}{2}, \frac{5}{2}}$

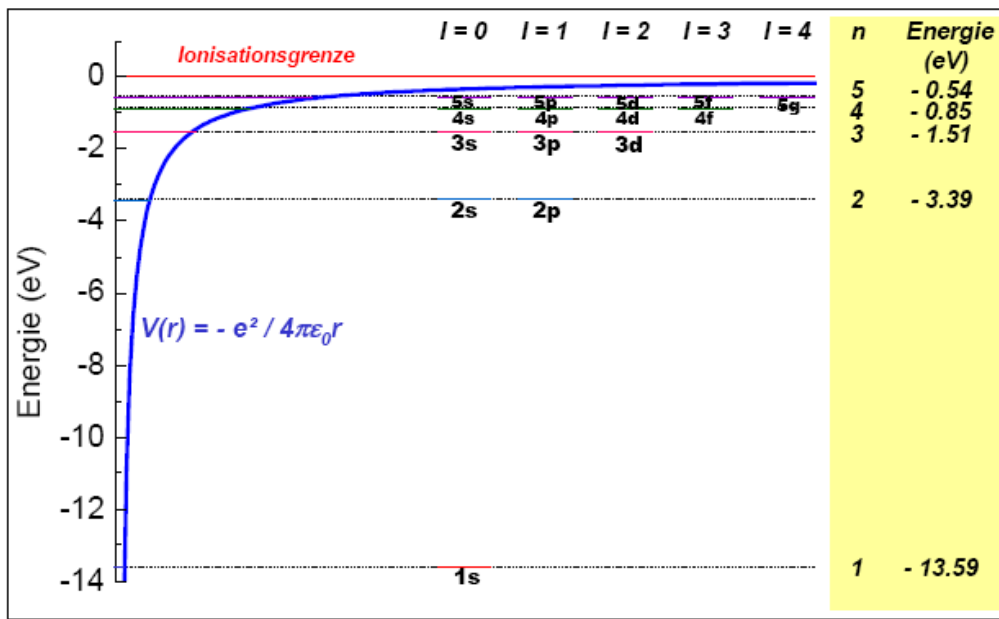
Aufhebung der Entartung

Die Energieniveaus des H-Atoms werden durch 3 Quantenzahlen charakterisiert:

1. Hauptquantenzahl n : $E \propto \frac{1}{n^2}$
2. Drehimpulsquantenzahl l : $l = 0, 1, \dots, n-1$ (wird auch Nebenquantenzahl genannt, da E unabhängig von l ist)
3. Magnetische Quantenzahl: $-l \leq m \leq l$

Bei **Kugelsymmetrie** d.h. $V \propto \frac{1}{r}$, gilt:

$E_{n,l,m}$ unabhängig von l, m , d.h. $E_{n,l,m} = E_{n,l',m'}$ (= entartete Energieniveaus)



Entartung (Kugelsymmetrie) aufgehoben durch:

externe B,E-Felder
interne B,E-Felder
relativ. Korrekturen
Vakuumpolarization

Ursachen für Abweichung der Kugelsymmetrie

Interne E-Felder: bei mehreren Elektronen schirmen innere Elektronen die Kernladung ab. Kommt später bei Mehrelektron-Atomen.

$$E_{int} : \quad \Delta E = eU_{int} \approx 10eV \rightarrow E_{int} = \frac{U_{int}}{r} = \frac{10V}{10^{-10}m} = 10^{11} \frac{V}{m}$$

Im Labor erreichbar : $\simeq 10^8 \frac{V}{m}$

Interne B-Felder:

- a) Bewegung der Elektronen erzeugt Strom und damit B-Feld
 $\Rightarrow$ Bahnmagnetismus.
- b) Elektronen haben Eigendrehimpuls (SPIN genannt)
(klassisch: Drehbewegung, aber punktförmiges Teilchen hat keine Trägheitsmoment und ist auch nicht quantisiert.
Spin ist reiner Quanteneffekt mit Quantenzahlen analog zum Drehimpuls $l = \frac{1}{2} \hbar$)

Aus der relativistischen Elektrodynamik ($\equiv$ Biot – Savart $\times \frac{1}{2}$) folgt :

$$\vec{B}_l = \frac{Ze\mu_0 \vec{l}}{8\pi r^3 m_0} = O(1T) \text{ für } Z = 1 \text{ und } r = 1 \text{ Å} \equiv 10^{-10}m \quad (2)$$

Im Labor: 20T erreichbar

Experimentelle Befunde: Aufhebung der Entartung

Da Wasserstoff als Molekül vorliegt, muss man für die Spektroskopie an atomarem Wasserstoff erst die H_2 -Moleküle dissoziieren. Dies kann man entweder durch hohe Temperaturen ($1500\text{-}2000^\circ\text{C}$), durch geeignete Katalysatoren oder durch Elektronenstoß in einer Gasentladung erreichen. Für die hochauflösende Spektroskopie verwendet man üblicherweise Gitterspektrometer (siehe Physik III) oder höchstauflösende Laserspektroskopie. Hierbei ist zu beachten, dass für $\lambda < 200\text{ nm}$ Luft zu absorbieren beginnt und man deshalb das Spektrometer evakuieren muss.

Die hochauflösende Spektrometrie an Wasserstoff zeigt, dass die Emissionslinien des Wasserstoffatoms sich zwar in Serien entsprechend (4.0.1) anordnen lassen, dass es aber signifikante Abweichungen von den Vorhersagen des bisher verwendeten Modells gibt. Insbesondere werden folgende Beobachtungen gemacht:

- Bei Anlegen eines Magnetfeldes spalten die Linien in mehrere Linien auf. **(Zeeman-Effekt)**
- Die Wellenzahlen $\bar{\nu}_{ik}$ der verschiedenen Übergänge hängen außer von den Hauptquantenzahlen n auch von der Bahndrehimpulsquantenzahl l ab. Die absoluten Zahlenwert von $\bar{\nu}_{ik}$ weichen beim Wasserstoffatom um bis zu 0.2 cm^{-1} von der theoretischen Vorhersage ab.
- Alle Spektrallinien, die von den s -Niveaus ($l = 0$) ausgehen, bestehen aus zwei eng benachbarten Komponenten, die man als *Dubletts* bezeichnet (siehe Abb. 4.1: Dublette 4/5, 6/7). Die Spektrallinien für $l > 0$ bestehen sogar aus mehreren Komponenten.
- Der Grundzustand ($n = 1, l = 0$) zeigt eine sehr feine Aufspaltung, die man als *Hyperfeinstruktur* bezeichnet. Man stellt fest, dass diese Hyperfeinstruktur für ^1_1H und ^2_1H (Deuterium) unterschiedlich ist, also vom Kern abhängt.

Nobelpreis Zeeman

Pieter Zeeman (1865 - 1943), Nobelpreis für Physik 1902:

Pieter Zeeman wurde am 25. Mai 1865 in Zonnemaire geboren.

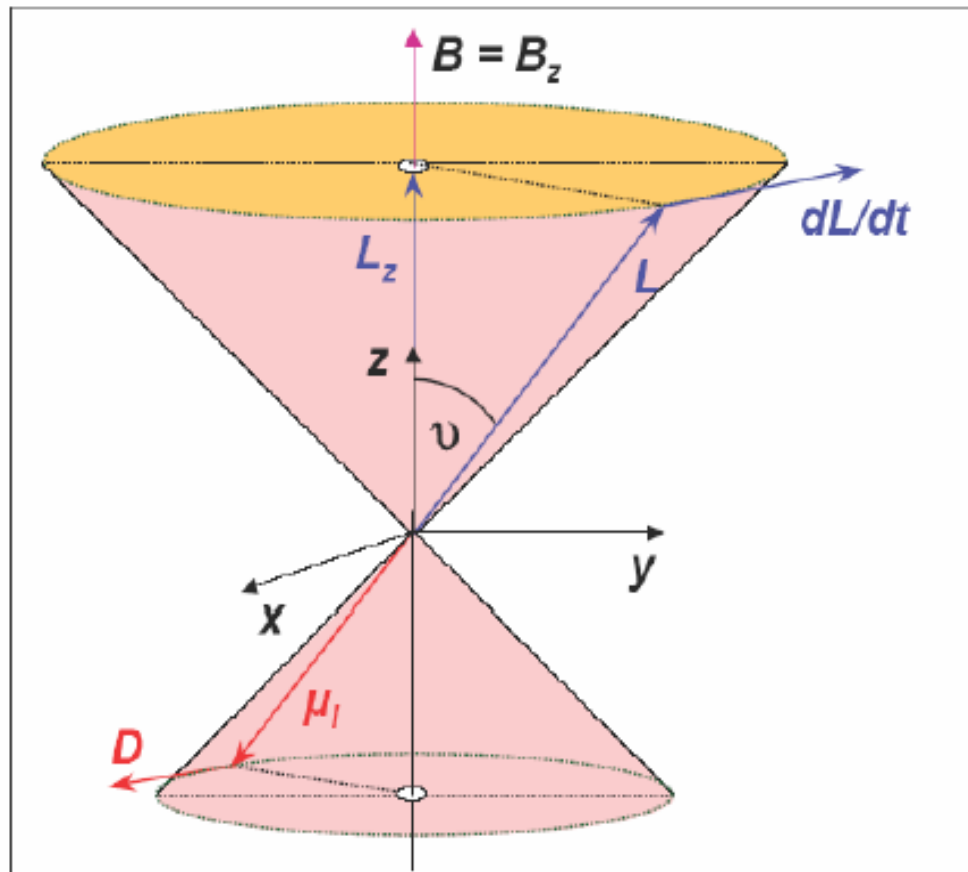
Er war seit 1900 Professor in Amsterdam. Auf Anregung von Lorentz entdeckte er 1896 den magnetooptischen Effekt der Aufspaltung von Spektrallinien (bei Natrium, und später bei Zink und Cadmium) in mehrere eng benachbarte Linien, welche Michael Faraday vergeblich gesucht hatte. Mit einem Spektralapparat großer Auflösung entdeckte er, dass die Größe des Linienabstandes proportional der magnetischen Feldstärke ist. Dieser später nach ihm benannte Zeeman-Effekt wurde zur Erforschung der Feinstruktur der Atome herangezogen. Hendrik Lorentz fand eine klassische Erklärung dieses Effektes, nach der jede Spektrallinie eines Atoms in drei Komponenten aufspalten sollte. Dieses Lorentz-Triplett bezeichnete man als normalen Zeeman Effekt. Das Aufspalten von Atomen in kompliziertere Strukturen wurde aus historischen Gründen als anomaler Zeeman-Effekt bezeichnet. 1902 erhielten Lorentz und Zeemann für ihre Entdeckung den Nobelpreis für Physik.

Pieter Zeeman verstarb am 9. Oktober 1943 in Amsterdam.



<http://phys.educ.ksu.edu/vqm/html/zeemanspec.html>

Normaler Zeeman-Effekt



Klassisch: drehendes Elektron -> magnetisches Moment $p \propto L$
QM: Quantisierung von L -> Quantisierung von p -> 'Kompassnadel'
hat nur bestimmte Einstellungen und Energien!

Magnetisches Moment

Das Drehmoment auf eine Leiterschleife durch die Lorentz-Kraft ist:

$$T = 2a \frac{b}{2} \sin \alpha I a b B$$

Mit dem Flächenvektor $\vec{A}$:

$$\vec{T} = I \vec{A} \times \vec{B}$$

Analog zum elektrischen Dipol  ist das **magnetische Moment**

$$\vec{p}_m = I \vec{A}$$

Also ist das Drehmoment

$$\vec{T} = \vec{p}_m \times \vec{B}$$

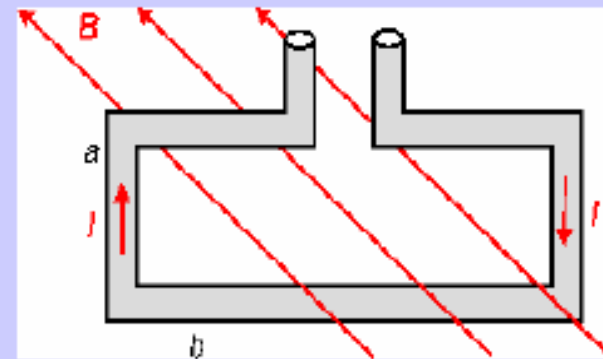
Magnetische Momente richten sich parallel zum Magnetfeld aus, das dadurch verstärkt wird.

Im inhomogenen Feld wirkt die **Kraft** (vgl. )

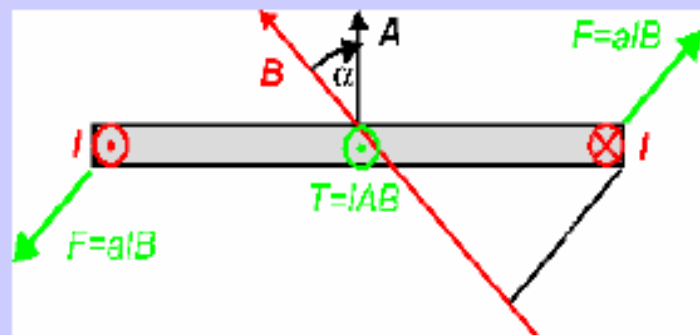
$$\vec{F} = (\vec{p}_m \nabla) \vec{B}$$

Eine Verkipfung bedeutet **potentielle Energie**

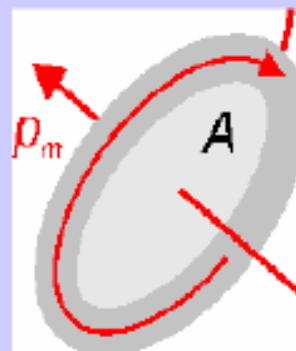
$$E_{pot} = -\vec{p}_m \vec{B}$$



Stromdurchflossene
Leiterschleife im
Magnetfeld



In Aufsicht



Magnetisches Moment = Fläche x Strom

Bahnmagnetismus (klassisches Modell)

Elektron auf Kreisbahn mit Frequenz $\mathbf{f} = v/2\pi r \rightarrow$ elektr. Strom

$I = -e \cdot \mathbf{f} = -e \cdot v/2\pi r \rightarrow$ magnetisches Moment

$\mathbf{p}_m = I \cdot \vec{A} = I \cdot \pi r^2 \hat{n} = -e \cdot v(r/2) \cdot \hat{n}$ mit

$\vec{A} = \pi r^2 \hat{n}$ Flächennormale senkrecht zu πr^2

Bahndrehimpuls des Elektrons: $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} = m_e \cdot r \cdot v \cdot \hat{n}$

$$v = \frac{2\pi r}{t}$$

$$\mathbf{f} = 1/t$$

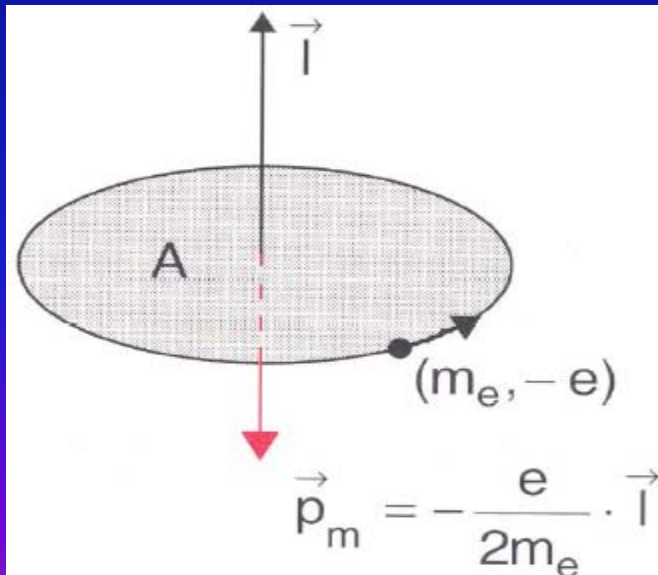


Abb. 5.8. Klassisches Modell für Drehimpuls $\mathbf{l}$ und magnetisches Moment $\mathbf{p}_m$ eines auf einer Kreisbahn umlaufenden Atoms

“Normaler” Zeeman-Effekt (Atome ohne Elektronenspin)

Bahnmagnetismus $\propto$ Drehimpuls + Quantisierung des Drehimpulses
 $\Rightarrow$ Aufspaltung in diskrete Energieniveaus in äußerem Magnetfeld
 $\Rightarrow$ Zeeman-Effekt

Es ergibt sich. $\vec{p}_m = -\frac{e}{2m_e} \cdot \vec{l}$

Magnetische Moment $\vec{p}_m$ proportional zu Bahndrehimpuls $\vec{l}$

In äußeren Magnetfeld $\vec{B}$ ist die potentielle Energie:

$$E_{pot} = -\vec{p}_m \cdot \vec{B} = +\frac{e}{2m_e} \cdot \vec{l} \cdot \vec{B}$$

B in z-Richtung $\vec{B}(0, 0, B_z = B)$ wegen $l_z = m \cdot \hbar$

$$E_{pot} = \frac{e\hbar}{2m_e} \cdot m \cdot B$$

m....magnetische Quantenzahl; $-l \leq m \leq +l$

$$V_{pot} = \int D d\alpha = \int \vec{\mu} \times \vec{B} d\alpha = \int |\mu| |B| \sin \alpha d\alpha \equiv |\mu| |B| \cos \alpha = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

"Normaler" Zeeman-Effekt

Proportionalitätsfaktor

$$\mu_B = \frac{e \cdot \hbar}{2m_e} = 9,274015 \cdot 10^{-24} \text{ J/T } \text{Bohrsches Magneton} \quad (\text{J/T} = \text{Am}^2)$$

Äußeres Magnetfeld B bewirkt zusätzliche Energie eines Zustandes (n, l, m) : $\Delta E_m = \mu_B \cdot m \cdot B$

Terme des Wasserstoffatoms im Magnetfeld

$$E_{n,l,m} = E_{\text{Coul}}(n, l) + \mu_B \cdot m \cdot B$$

Entartung der $(2l+1)$ m -Zustände spalten durch Magnetfeld in $(2l+1)$ äquidistante Zeeman-Komponenten auf $\rightarrow \Delta E = \mu_B \cdot B$

Aufspaltung nennt man "normaler Zeeman Effekt"

Experimentelle Beobachtung: Emission oder Absorption von Licht durch Atome in Magnetfeld: Es treten nun Übergänge zwischen atomaren Zuständen mit $\Delta m = m_2 - m_1 = +1$ auf - zusätzliche Linien!

Anomaler Zeeman-Effekt berücksichtigt Spin (später mehr)

Polarisation beim Zeeman-Effekt

3 Linien beobachtet : $\Delta m_j = 0 \rightarrow \Pi - \text{Uebergänge}$ genannt
 $\Delta m_j = \pm 1 \rightarrow \sigma - \text{Uebergänge}$

Licht ist polarisiert : $\left. \begin{array}{l} E \perp B \text{ fuer } \sigma \\ E \parallel B \text{ fuer } \Pi \end{array} \right\} \text{Uebergänge}$

Lorentz - Erklärung (klassisch): Das Elektron bewegt sich in 3 unabhängigen Richtungen um den Kern.

Dieses kann man beschreiben durch 3 "Ersatz-Elektronen" :

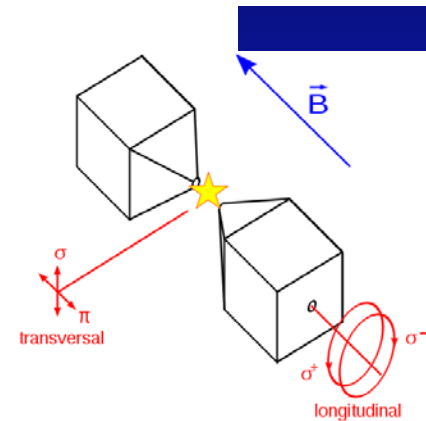
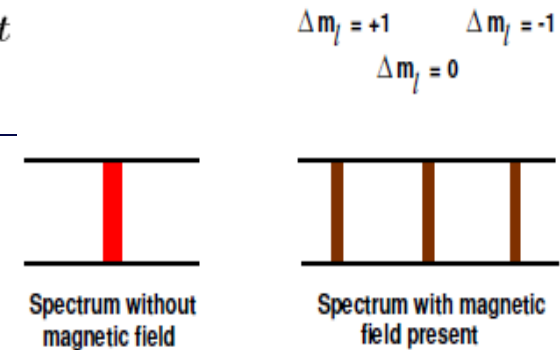
1. schwingt linear entlang B
2. + 3. schwingen entgegengesetzt zirkular zueinander in der Ebene $\perp \vec{B}$

Ohne Magnetfeld : Zentrifugalkraft = Coulombkraft

$$\rightarrow m\omega_0^2 r = \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \rightarrow \omega_0 = \sqrt{\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 m r^2}}$$

Mit Magnetfeld entlang Z: zusätzliche Lorentzkraft für (2) + (3) : $\rightarrow h\omega = h\omega_0 + g_j m_j \mu_B B$

$$E \uparrow \begin{array}{l} \text{---} +g_j m_j \mu_B B \\ \text{---} -g_j m_j \mu_B B \end{array}$$



<http://phys.educ.ksu.edu/vqm/html/zeemanspec.html>

Zeeman-Effekt

Beobachtung von Zeeman 1896

Spektrallinien von Atomen im **Magnetfeld**:

- ▶ Spalten in 3 Linien auf (Triplets)
- ▶ Linienabstand wächst mit B
- ▶ Linienabstand ist für alle Atome gleich

Elektron auf Kreisbahn: **magnetisches Moment** $\leftrightarrow$

$$\vec{p}_m = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$$

Dadurch ändert sich potentielle Energie im Hamilton-Operator um $\leftrightarrow$

$$E_B = -\vec{p}_m \vec{B} = \frac{e}{2m_e} BL_z$$

Die Energieentartung der Zustände ist aufgehoben:

$$E_{nm} = E_n + \frac{eB}{2m_e} \hbar m = E_n + \mu_B B m$$

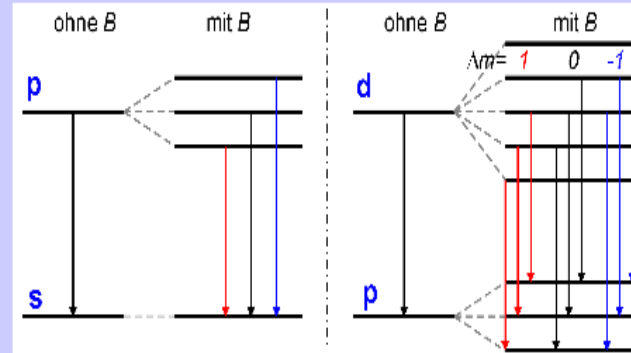
Mit dem **Bohr-Magneton**

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,2732 \cdot 10^{-24} \frac{\text{J}}{\text{T}}$$

Die **Zeeman-Aufspaltung** ist

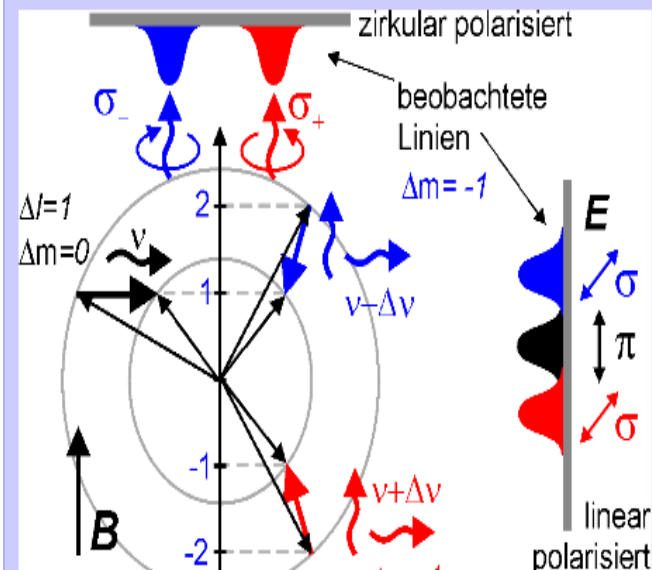
$$\Delta E = E_{n,m+1} - E_{n,m} = \mu_B B$$

Aufspaltung von Linien in Triplets



In beiden Fällen mit Magnetfeld werden Photonen mit drei unterschiedlichen Energien emittiert.

Beobachtete Linien



Der Elektronenspin (Eigendrehimpuls)

Experimentelle Befunde (Feinstruktur der Spektren, anormaler Zeeman Effekt, Stern Gerlach Versuch) Zeigen, dass Elektronen:
Masse m_0 Ladung $-e$ weitere charakteristische Eigenschaft besitzen
→ **Elektronenspin** → magnetisches Moment μ_s

Otto Stern²⁴ und Walter Gerlach²⁵ führten 1921 das nach ihnen benannte *Stern-Gerlach-Experiment* durch (vergleiche Physik III). Dieses Experiment zeigte klar, dass Elektronen außer ihrer Ladung $-e$ und ihrer Ruhemasse m_0 noch eine weitere Eigenschaft besitzen müssen, die wir Elektronenspin nennen. Samuel A. Goudsmit (1902-1978) und George E. Uhlenbeck (1900-??) stellten 1925 die Hypothese auf, dass freie Elektronen einen Eigendrehimpuls besitzen, den sie *Elektronenspin* S nannten. Im Stern-Gerlach Experiment wurden nur zwei mögliche Einstellungen der z -Komponente des Spins gefunden. Wir können den Spin freier Elektronen also mit der Spinquantenzahl $s = 1/2$ beschreiben. Etwas lax sagt man meist, dass Elektronen den Spin $1/2$ besitzen.

Es ist nun naheliegend, für den Betrag $|S|$ des Spins und seine Komponente S_z analoge Beziehungen wie für L und L_z anzunehmen (vergleiche (3.3.57) und (3.3.59)):

$$|S| = \sqrt{s(s+1)} \hbar = \sqrt{3/4} \hbar$$

$$S_z = m_s \hbar = \pm \frac{\hbar}{2}.$$

$$\hat{S} \times \hat{S} = i\hbar \hat{S} \quad (3.4.1)$$

$$(3.4.2)$$

Stern-Gerlach Effekt

Ablenkung von Ag-Atome in inhomogenen Magnetfeld

mit Magnetfeld gab es Aufspaltung der Verteilung der Ag-Atome →
ablenkende Kraft auf Ag-Atome → magnetisches Moment p_m

Kraft auf magnetischen Dipol im inhomogene Magnetfeld

$$\vec{F} = -p_m \cdot \text{grad} \vec{B}$$

Grundzustand Ag-Atom s-Zustand mit $l = 0$ kein magnetisches
Bahnmoment möglich!

Goudsmit + Uhlenbeck (1925): Hypothese "**Elektronen besitzen
Eigendrehimpuls**" - **Elektronenspin s** - ist mit magnetische
Moment μ_s

verknüpft. Nach Drehimpulsregeln gilt:

$$|\vec{s}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar$$

Projektion auf z-Richtung $s_z = m_s \cdot \hbar \Rightarrow$ magnetische Spinmoment
 $\vec{\mu}_s = \gamma \cdot \vec{s}$

γ ...gyromagnetisches Verhältnis - experimentell bestimmt.

Stern-Gerlach Effekt

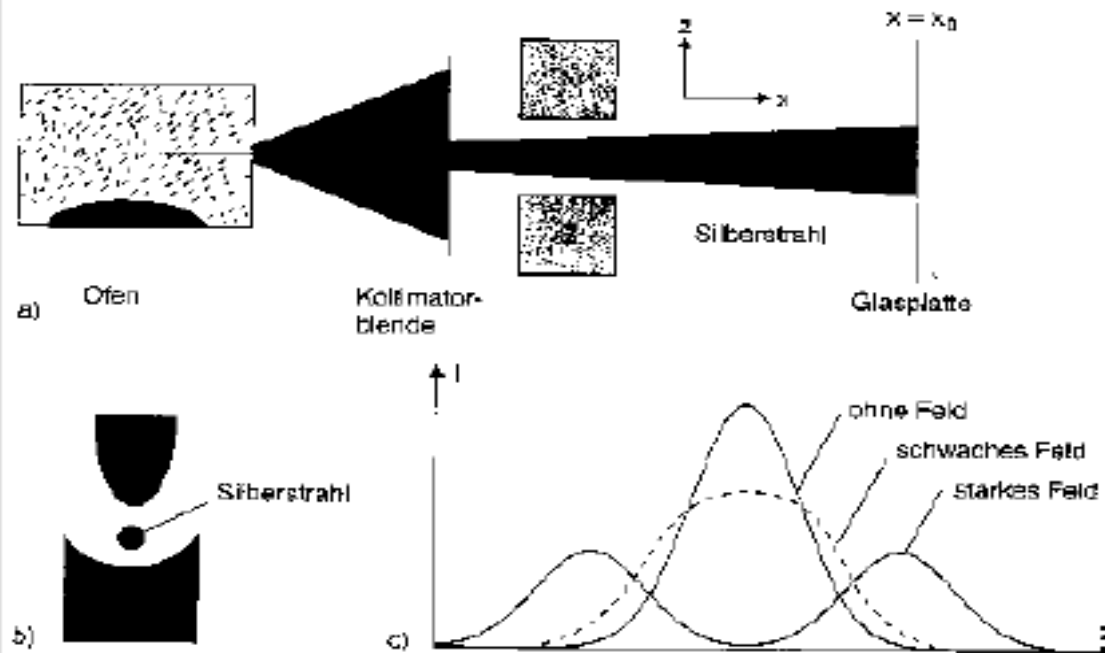


Abb. 5.15a–c. Stern-Gerlach-Versuch. (a) Versuchsaufbau; (b) Schnitt in der y-z-Ebene durch das inhomogene Magnetfeld; (c) Schwärzungssintensität $I(z)$ auf der Glasplatte mit und ohne Magnetfeld

160

5. Das Wasserstoffatom

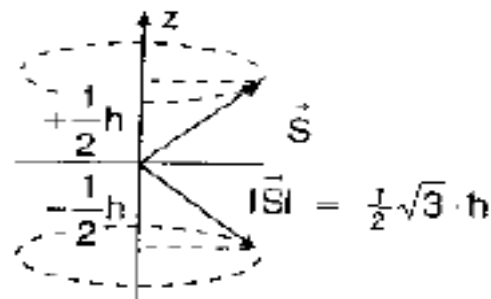
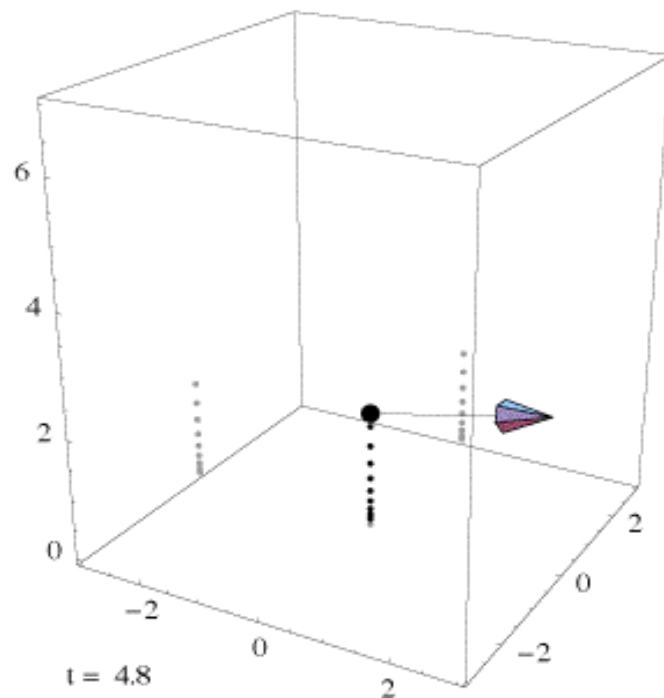


Abb. 5.16. Die beiden möglichen Einstellungen des Elektronenspins bezüglich der Magnetfeldrichtung (z -Richtung)

3.1. Inhomogeneous B-field

1: Neutral particle with magnetic moment



Inhomogeneous magnetic field

2

(of 5)

Neutral particle with a magnetic moment.

The direction of the force is given by the direction in which the magnetic field increases. The axis of the precession is given by the direction of the magnetic field itself.

In this example, the particle gets uniformly accelerated in the z -direction. The trajectory of the particle is indicated by a series of points (stroboscopic images showing the particle's position after equal time steps). For better visibility, we also show the projections ("shadows") of the points on the bounding box. The magnetic field causes a constant acceleration in the vertical z -direction. The force is given by the gradient of the scalar product

$$\mu \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x})$$

at the position of the particle.

Here it is assumed that the vectorfield $\mathbf{B}$ points in the vertical direction, $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$. The function B_z is positive, depends only on the z -coordinate, and increases in the vertical direction. Hence the force is

$$\mathbf{F} = \nabla \mu \cdot \mathbf{B} = \mu_z \nabla B_z.$$

The uniform acceleration results from the choice $B_z = z + 1$, that is, $\nabla B_z = (0, 0, 1)$.

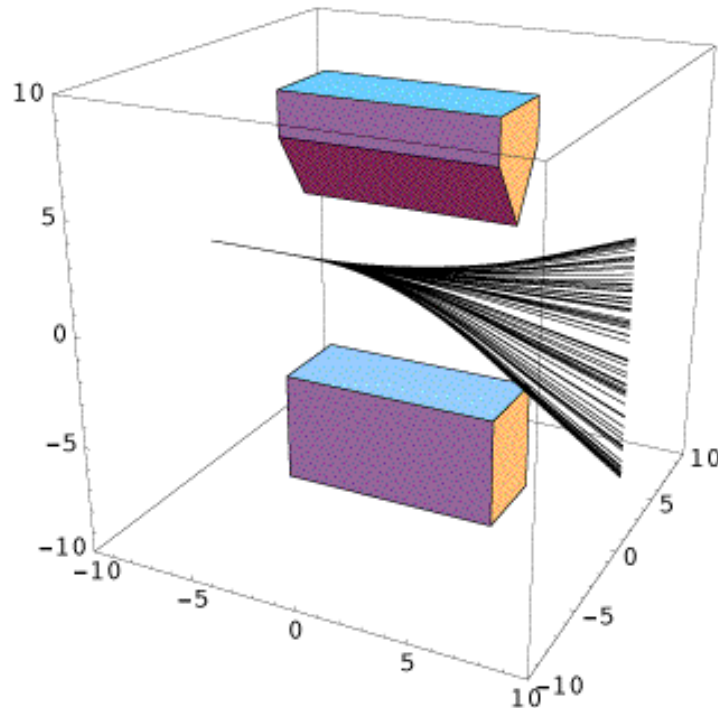
3.1.1.2

Topics

- 1: Neutral particle with magnetic moment
- 2: Acceleration in direction of field gradient
- 3: Realistic field: Force in two directions
- 4: Realistic field with a large z -component

3.4. Stern-Gerlach - classical

2: Trajectories for particles with random spin



Classical Stern-Gerlach experiment – 2 1

(of 1)

Magnetic moments in various directions

The movie shows the paths through a Stern-Gerlach apparatus of an ensemble of classical particles with random directions of the magnetic moment.

Theoretical background: A collection of classical particles with randomly chosen directions of the magnetic moment are sent through the Stern-Gerlach apparatus described in [CD 3.4.1](#). The inhomogeneity of the field applies a force depending on the direction of the magnetic moment. The magnetic field is designed in such a way that inside the apparatus the force only acts in the vertical direction. Thus the particles are deflected vertically from their initially straight path. With μ_z also the deflecting force is randomly distributed around 0.

The experiment was first carried out with a beam of silver atoms generated in a hot furnace. It can be expected that particles emerging from a furnace have randomly distributed magnetic moments. According to the classical model, this beam would become broader in the z -direction when sent through a Stern-Gerlach apparatus. Actually, the beam splits just into two components. This indicates that the component μ_z of the magnetic moment μ can actually assume only two values.

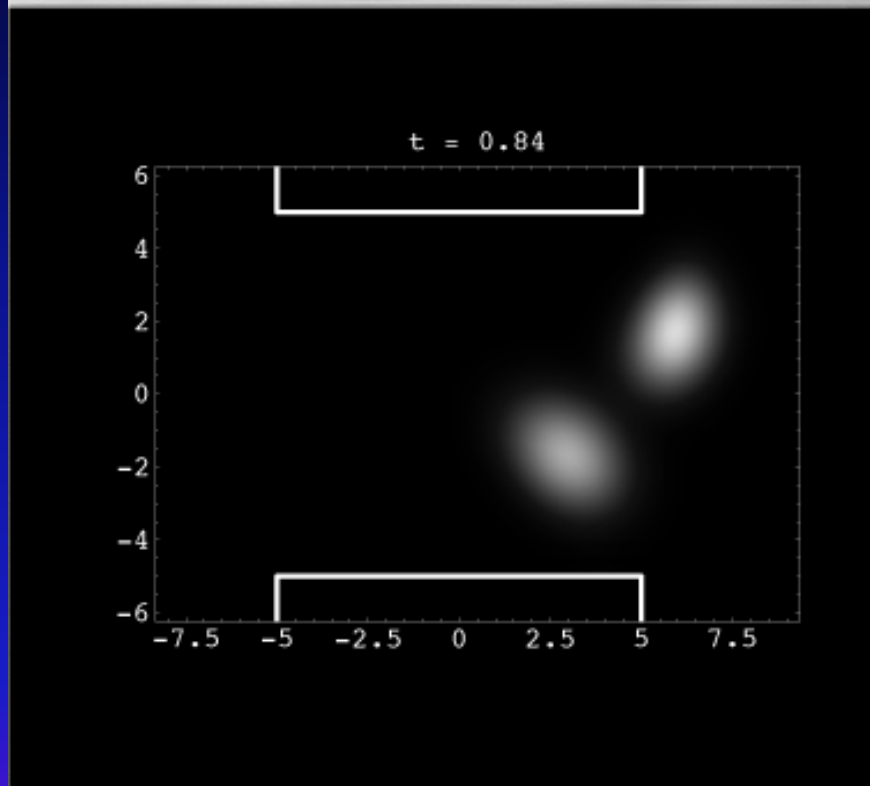
3.4.2.1

Topics

- 1: Neutral particles with various spins
- 2: Trajectories for particles with random spin
- 3: Two- and four-wire fields

3.5. Stern-Gerlach experiment

3: Superposition of the two types



Topics

- 1: Type-1 particles in an inhomogeneous field
- 2: Particles of type 2
- 3: Superposition the two types
- 4: Another superposition

Wave packets in a Stern-Gerlach device 3

(of 4)

account, we write the state of a particle as a column vector,

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ (for type 1), and } \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \text{ (for type 2).}$$

Then a state of type 1, having only an upper component, is automatically orthogonal to a state of type 2, for which the upper component is zero.

According to the superposition principle, a superposition of two states is again a possible state of the system. Hence the states of type 1 and the states of type 2 can be superimposed. The result is a wave packet that splits into exactly two parts when it passes a Stern-Gerlach device. It can be described by the formula

$$\begin{pmatrix} a\psi_1 \\ b\psi_2 \end{pmatrix}.$$

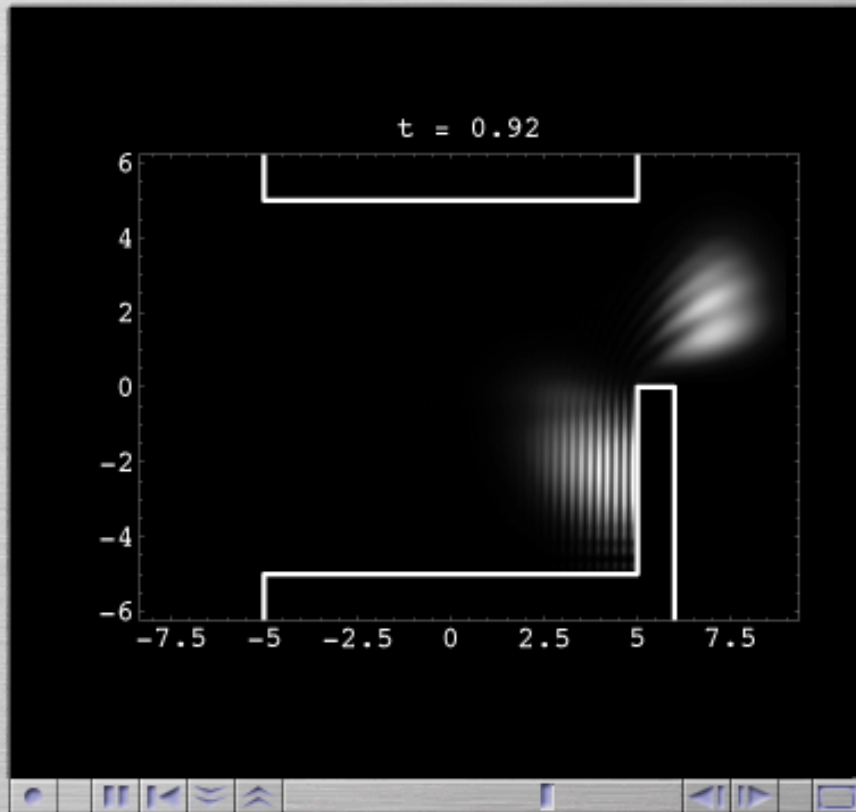
The first component describes the behavior of a particle with positive μ_z , the second component describes the behavior of a particle with negative μ_z . [CD 3.5.3](#) shows a superposition, where both parts have equal size. For [CD 3.5.4](#) the part of type 1 is larger. In any case, the two parts individually behave like the wave packets in the movies [CD 3.5.1](#) and [CD 3.5.2](#).

3.5.1-4.3



3.7. Stern-Gerlach filter

1: Preparing a spin-up wave packet



The Stern-Gerlach filtering device

1

(of 2)

Preparing a wave packet with spin-up/down.

A simple modification of the Stern-Gerlach experiment works as a state preparation procedure. By blocking the “wrong” path in the apparatus we can prepare a wave packet with spin-up or spin-down.

Description: Here the Stern-Gerlach experiment has been modified. One of the two possible “paths” of wave packets through the apparatus is blocked by an impenetrable obstacle. Only a wave packet with spin-up can pass the apparatus in [CD 3.7.1](#) in an essentially unperturbed way. A wave packet with spin-down is deflected downward and runs into the obstacle. (Similarly, a wave packet must have spin-down in order to fly through the apparatus in [CD 3.7.2](#).) If the initial state is a superposition of spin-up and -down, the wave packet will split into two parts. Only the part with the “right” spin emerges from the apparatus, the other part is reflected. No matter what the initial state is, we can be sure that whenever something emerges from the apparatus, it must have the corresponding spin direction.

3.7.1-2.1

Topics

- 1: Preparing a spin-up wave packet
- 2: Preparing a spin-down wave packet



Aus experimenteller Beobachtung der Aufspaltung der Ag-Atome in zwei Teilstrahlen folgt: es gibt nur zwei Spineinstellungen.

Es muß daher wegen $-s \leq m_s \leq +s$ und $\Delta m_s = \pm 1$ gelten

$$s = 1/2 \Rightarrow m_s = \pm 1/2$$

$$|\vec{s}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar = \frac{1}{2} \sqrt{3} \cdot \hbar$$

Elektronen sind Teilchen mit Spin 1/2!!!

Gehorchen Fermistatistik!

Zusammenfassung aus Stern-Gerlach-Exp. an vielen Atomen

1. Es gibt eine Richtungsquantelung; die Atome haben nur diskrete Möglichkeiten, den Drehimpuls relativ zu einem Magnetfeld B einzustellen und behalten diese Einstellung im freien Raum bei (wie bei einem Kreisel).

2. Die Messwerte für atomare magnetische Momente sind wie folgt :

$$\begin{aligned} |\mu_Z| &= m\mu_B, & -s \leq m_S \leq s & \text{ fuer } \textit{Spinmagnetismus} \\ & & -l \leq m_L \leq l & \text{ fuer } \textit{Bahnmagnetismus} \end{aligned}$$

3. Für alle Atome, die als äußerstes Elektron ein s-Elektron haben, findet man die gleiche Aufspaltung in NUR 2 Strahlen.

⇒ mechanische und magnetische Momente aller inneren Elektronen heben sich gegenseitig auf.

4. Ein s-Elektron hat den Bahndrehimpuls $\vec{l} = 0 \rightarrow \vec{\mu}_l = 0 \rightarrow$ nur Spinmagnetismus.

Verhältnis magnetisches Moment zu mechanischen Drehimpuls ist für Spin doppelt so groß als für Bahndrehimpuls!

Man schreibt analog zu $\vec{\mu}_l = (\mu_B/\hbar) \cdot \vec{l}$

$$\vec{\mu}_s = -g_s(\mu_B/\hbar) \cdot \vec{s}$$

$g_s \approx 2$ "Lande-Faktor"

$g_s=2$ kann nur aus relat. Dirac Wellengleichung hergeleitet werden. Exp. Bestätigung durch Einstein-de Haas-Effekt (kommt später)

Einstein-de Haas-Effekt (Wiki)

The Einstein-de Haas effect is a physical phenomenon delineated by Albert Einstein and Wander Johannes de Haas in the mid 1910's, that exposes a relationship between magnetism, angular momentum, and the spin of elementary particles.

The effect corresponds to the mechanical rotation that is induced in a ferromagnetic material (of cylindrical shape and originally at rest), suspended with the aid of a thin string inside a coil, on driving an impulse of electric current through the coil.^[1] To this mechanical rotation of the ferromagnetic material (say, iron) is associated a mechanical angular momentum, which, by the law of conservation of angular momentum, must be compensated by an equally large and oppositely directed angular momentum inside the ferromagnetic material.

Given the fact that an external magnetic field, here generated by driving electric current through the coil, leads to magnetization of electron spins in the material (or to reversal of electron spins in an already magnetised ferromagnet — provided that the direction of the applied electric current is appropriately chosen), the Einstein-de Haas effect demonstrates that spin angular momentum is indeed of the same nature as the angular momentum of rotating bodies as conceived in classical mechanics. This is remarkable, since electron spin, being quantized, cannot be described within the framework of classical mechanics.

Einstein-de Haas-Effekt

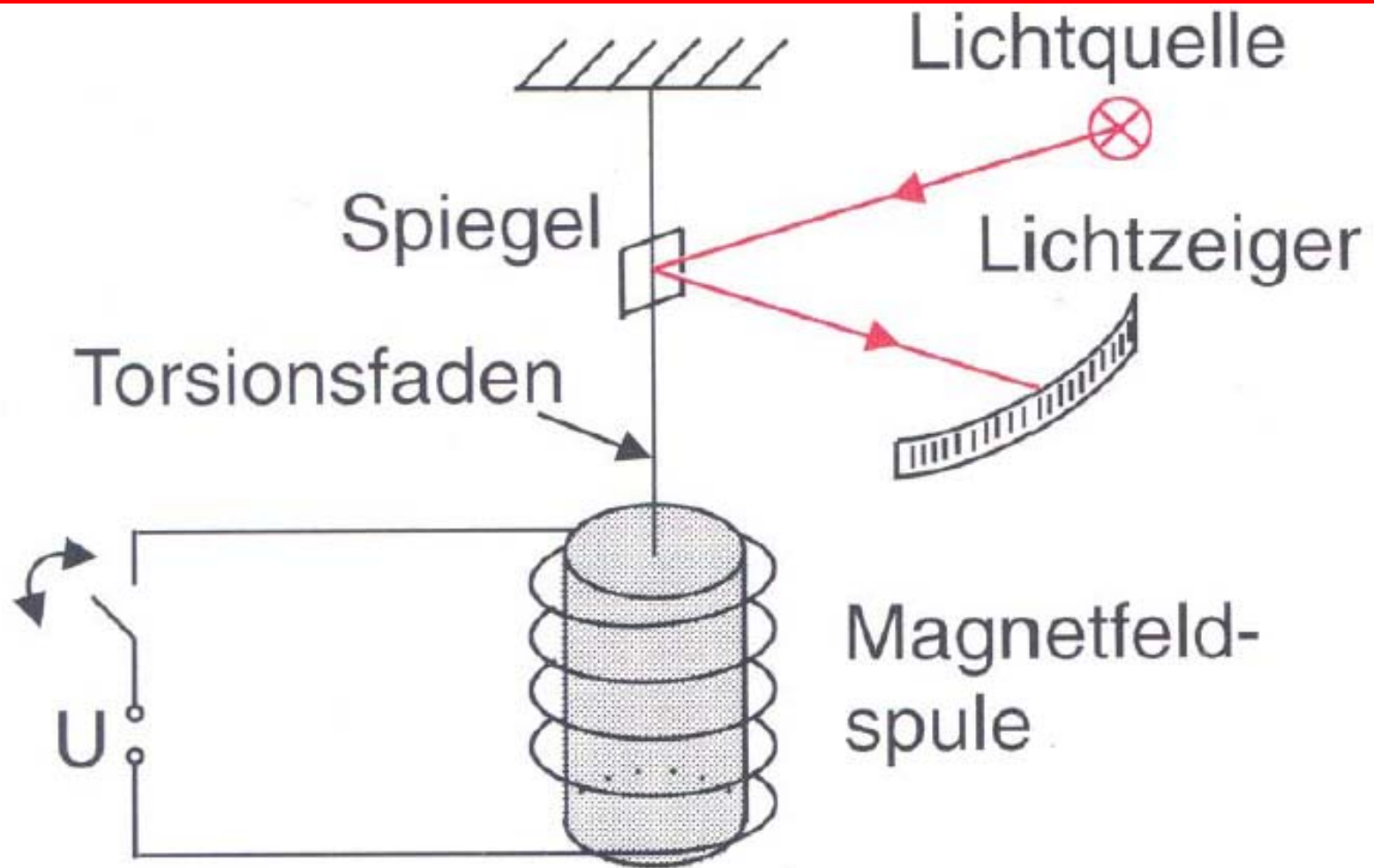


Abb. 5.17. Einstein-de Haas-Effekt

Magnetisierung

In Materie induzierte Wirbelströme erzeugen ein magnetisches Moment:

$$P_m = IA = jld A$$

Daraus definieren wir die **Magnetisierung**

$$J = \frac{P_m}{V} = jd \quad [\text{A/m}]$$

Wie in einer Spule entsteht daraus das Feld

$$\vec{B}_m = \mu_0 \frac{jdl}{l} = \mu_0 \vec{J}$$

Das Gesamtfeld innerhalb Materie ist also

$$\vec{B} = \vec{B}_0 + \vec{B}_m = \vec{B}_0 + \mu_0 \vec{J}$$

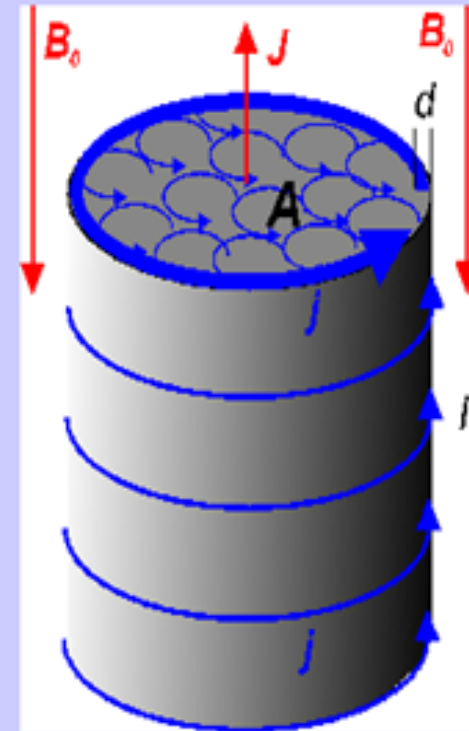
Für Stoffe mit der Eigenschaft

$$\vec{J} = \frac{\chi}{\mu_0} \vec{B}_0$$

Gilt:

$$\vec{B} = (1 + \chi) \vec{B}_0 = \mu \vec{B}_0$$

Wirbelströme heben sich im Innern auf. Effektiv fließt ein Oberflächenstrom in einer Schichtdicke d .



Materialeigenschaften:

- Suszeptibilität: χ [-]
- Permeabilität: $\mu_r = 1 + \chi$ [-]

Diamagnetismus und Paramagnetismus

Diamagnetismus liegt vor wenn:

- ▶ $\chi < 0$
- ▶ $\mu_r < 1$
- ▶ $|\chi| \ll 1$

Das äußere Feld wird geschwächt: $B < B_0$

Wegen 

$$\vec{F} = (\vec{p}_m \nabla) \vec{B} = V \frac{\chi}{\mu_0} (\vec{B}_0 \nabla) \vec{B}_0 < 0$$

werden diamagnetische Stoffe von einem Feldgradienten **abgestoßen**.

Entsteht durch:

- Induktion von Wirbelströmen (klingt wegen elektrischem Widerstand ab).
- Induktion von Strömen in gebundenen Elektronen

$$\chi = -\frac{1}{2} \mu_0 n Z \frac{e^2}{m} \langle r^2 \rangle$$

Atom mit Radius r , Ladungszahl Z , Elektronenmasse m und Dichte n .

Paramagnetismus liegt vor wenn:

- ▶ $\chi > 0$
- ▶ $\mu_r > 1$
- ▶ $|\chi| \ll 1$

Das äußere Feld wird gestärkt: $B > B_0$

Hier ist

$$\vec{F} = V \frac{\chi}{\mu_0} (\vec{B}_0 \nabla) \vec{B}_0 > 0$$

Paramagnetische Stoffe werden von Feldgradienten **angezogen**.

Entsteht durch:

- Ausrichtung von atomaren permanenten Dipolen

Einstein-de Haas-Effekt

Bestimmung des Verhältnisses magnetisches Moment des Elektrons zu Elektronenspin

Experiment: Eisenzylinder (Masse m , Radius R) hängt in longitudinalen B-Feld,

B hoch genug - Eisenzylinder in Sättigung $M = N \cdot \mu_s$; d.h. alle Spins der N freien Elektronen stehen antiparallel zur Feldrichtung

Feld wird umgepolt $\rightarrow$ magnetischen Spinmomente klappen ebenfalls um - Änderung der Magnetisierung: $\Delta M = 2M = 2N \cdot \mu_{sz}$

M-messen $\rightarrow N \cdot \mu_{sz}$ bestimmen

$$\Delta S = 2N \cdot \mu_{sz} = N \cdot \hbar = -\vec{L} = -I \cdot \omega$$

Änderung des mechanischen Drehimpulses aller Elektronen muß durch entgegengesetzten Drehimpuls $-\vec{L}$ des Zylinders kompensiert werden.

Gesamtdrehimpuls des Systems muß erhalten bleiben.

Einstein-de Haas-Effekt

Drehimpuls (Zylinder): $I \cdot \omega = -N\hbar$

$I = \frac{1}{2}mR^2$...mechanisches Trägheitsmoment

Vorgang führt zu Torsion - Winkel φ wird gemessen

Bestimmung des gyromagnetischen Verhältnisses.

$$\frac{\Delta M}{\Delta S} = \frac{\mu_{sz}}{s_z} = \gamma_s$$

Für Bahndrehimpuls des Elektrons gilt: $\gamma_l = \frac{|\vec{\mu}_e|}{|\vec{l}|} = \frac{e}{2m_e} = \mu_B/\hbar$

Einstein-de-Haas Versuch: $\gamma_s \approx \frac{e}{m_e} = 2\gamma_l$

Verhältnis magnetisches Moment zu mechanischen Drehimpuls ist für Spin doppelt so groß als für Bahndrehimpuls!

Man schreibt analog zu $\vec{\mu}_l = (\mu_B/\hbar) \cdot \vec{l}$

$$\vec{\mu}_s = -g_s(\mu_B/\hbar) \cdot \vec{s}$$

$g_s \approx 2$ "Lande-Faktor"

Zusammenfassung Elektronspin

Eigenschaften des Elektrons:

- Spinquantenzahl $s=1/2$
- innerer Drehimpuls (Spin) $S = (s(s+1))^{1/2}$
- magnetische Spinquantenzahl $m_s = \pm 1/2$

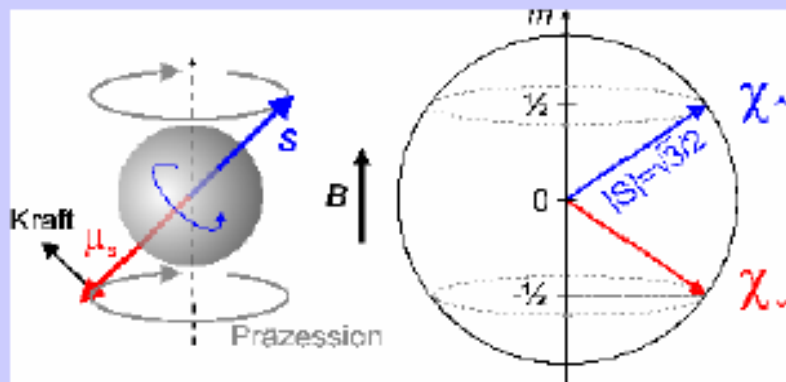
Magnetisches Moment des Elektrons

$$\vec{\mu}_s = -g_s \frac{e}{2m_e} \vec{S} = -g_s \mu_B \vec{S} / \hbar$$

mit dem **G-Faktor** $g_s = 2.0024$

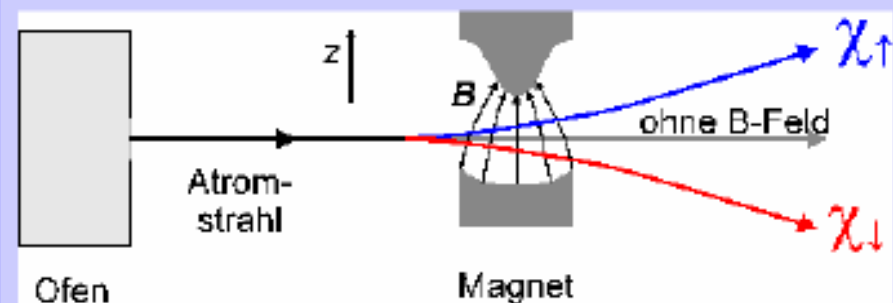
Die Wellenfunktion des Elektrons im H-Atom wird um den Spinanteil χ ergänzt, die nur 2 Werte annimmt

$$\psi_{nlm m_s} = R_{nl} Y_l^m \chi_{m_s}$$



Der Spin kann als Rotation des Elektrons um die eigene Achse aufgefasst werden (links), wobei das Elektron allerdings punktförmig ist! Im Magnetfeld kann sich der Spin in zwei Positionen ausrichten (rechts). Dann bewirkt das Drehmoment eine Präzessionsbewegung.

Stern-Gerlach-Experiment



Ein Strahl aus wasserstoffähnlichen Atomen spaltet in einem Magnetfeldgradienten in zwei nach der magnetischen Spinquantenzahl getrennte Strahlen auf.

Erklärung

auf magnetisches Moment wirkt die Kraft

$$F_z = -\mu_z \frac{dB}{dz} = g_s \frac{em_s \hbar}{m_e} \frac{dB}{dz}$$

dies führt zur Ablenkung des Strahls in Abhängigkeit von der magnetischen Spinquantenzahl.

Im Magnetfeld erzeugt das magnetische Moment ein Drehmoment, das wie beim Kreisel zu einer Präzessionsbewegung mit der Larmor-Frequenz führt:

$$\omega_L = \frac{\vec{p}_m \times \vec{B}}{L_z} = \frac{p_m B}{L} = \frac{\mu_s B}{S} = \frac{2g_s}{\hbar} B \mu_B$$

**Bahnfreq. in B-Feld: $mv^2/r = evB$
oder $\omega = v/r = eB/m = 2\mu_B/\hbar$**

Spin-Bahn-Kopplung V_{LS}

$\vec{\mu}_l$ und $\vec{\mu}_s$ beeinflussen einander $\Rightarrow$ Feinstruktur der Spektrallinien durch Spin-Bahn oder $\vec{L} - \vec{S}$ -Kopplung.

$\vec{\mu}_l$ erzeugt ein B-Feld B_l am Ort des Elektrons. Die Potentielle Energie lautet hierbei : $V_{l,s} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_l$ (1)

$$V_{pot} = \int D d\alpha = \int \vec{\mu} \times \vec{B} d\alpha = \int |\mu| |B| \sin \alpha d\alpha \equiv |\mu| |B| \cos \alpha = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Aus der relativistischen Elektrodynamik ($\equiv$ Biot – Savart $\times \frac{1}{2}$) folgt :

$$\vec{B}_l = \frac{Ze\mu_0 \vec{l}}{8\pi r^3 m_0} = O(1T) \text{ für } Z = 1 \text{ und } r = 1 \text{ Å} \equiv 10^{-10}m \text{ (2)}$$

(2) in (1) :

$$V_{l,s} = \frac{a}{\hbar^2} |l| |s| \cos(\vec{l}, \vec{s}) \approx 10^{-4} eV \text{ für } Z = 1 \text{ und } r = 1 \text{ Å} \text{ (3)}$$

$$a \equiv \frac{Ze^2 \mu_0 \hbar^2}{8\pi r^3 m_0^2}$$

Wie groß ist $|l| |s| \cos(\vec{l}, \vec{s})$?

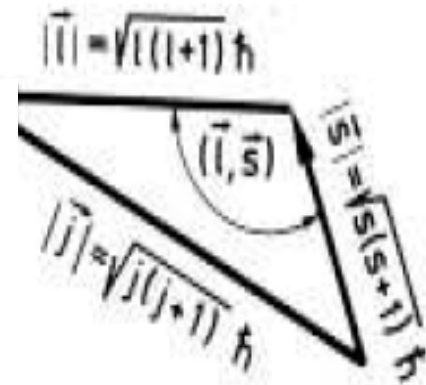
Vektormodell der Spin-Bahn-Kopplung

VEKTORMODELL : $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ (zuerst für ein Elektron)

Mathe : $a^2 = b^2 + c^2 + 2bc \cos \alpha$ ergibt mit $\left\{ \begin{array}{l} a^2 = l(l+1)\hbar^2 \\ b^2 = s(s+1)\hbar^2 \\ c^2 = j(j+1)\hbar^2 \end{array} \right\}$

$\Rightarrow \frac{|l||s|}{\hbar^2} \cos \alpha = \frac{a^2 - b^2 - c^2}{2} \rightarrow \text{aus (3)} :$

$$V_{l,s} = \frac{a}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$



Bisher hat man so gerechnet, als ob sich das Elektron auf festen Bahnen bewegt. In der Quantenmechanik geht man davon aus, dass es keine festen Bahnen gibt, daher ersetzt man $\frac{1}{r^3}$ durch den Mittelwert

$$\langle \frac{1}{r^3} \rangle = \int \frac{|\Psi|^2}{r^3} dV \rightarrow a \propto \frac{2}{r^3} \propto Z^4$$

Die $\vec{L} - \vec{S}$ Kopplung ist wichtig für große Z und kleine n.

Bei mehreren Elektronen :

$$\begin{array}{l} \vec{L} = \sum \vec{l}_i \\ \vec{S} = \sum \vec{s}_i \\ \vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \end{array}$$

Beispiel: Die berühmten Natrium D-Linien werden durch eine $\vec{L} - \vec{S}$ Kopplung in Dublett-Niveaus gespalten.

$$E_{n,l,s} = E_n + \Delta E_{LS} = E_n + \frac{\mu_0 Z e^2}{8\pi m_e^2 r^3} \langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \rangle$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(r) + \Gamma(r) (\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}})$$

Es gilt nun die Eigenfunktionen von $\hat{H}$ zu finden. Mit dem Kopplungsterm sind die Funktionen $|n, l, m, m_s\rangle$ sicherlich keine Eigenfunktionen von $\hat{H}$, da $\Gamma(r) = \frac{\mu_0 Z e^2}{8\pi m_e^2 r^3}$.

$$[\hat{S}_z, \hat{H}] = \Gamma(r) [\hat{S}_z, (\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}})] \neq 0.$$

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{H}] &= \Gamma(r) [\hat{L}_z, (\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}})] \\ &= \Gamma(r) [\hat{L}_z, (\hat{L}_x \cdot \hat{S}_x + \hat{L}_y \cdot \hat{S}_y + \hat{L}_z \cdot \hat{S}_z)] \\ &= i\hbar \Gamma(r) \{\hat{L}_y \cdot \hat{S}_x - \hat{L}_x \cdot \hat{S}_y\} \neq 0 \end{aligned}$$

Durch die Kopplung von $\mathbf{L}$ und $\mathbf{S}$ zu $\mathbf{J}$ sind aber die Projektionen von $\mathbf{L}$ und $\mathbf{S}$ auf die z -Achse nicht mehr fest und somit L_z und S_z keine Erhaltungsgrößen mehr. Im freien Atom verlieren also $\mathbf{S}$ und $\mathbf{L}$ ihre Bedeutung, da sie um $\mathbf{J}$ präzedieren und somit nicht mehr stationär sind. Das Drehimpulsverhalten wird durch $\mathbf{J}$ mit seinen Quantenzahlen j und m_j bestimmt.

Die Werte l und s behalten dagegen ihre Gültigkeit als gute Quantenzahlen bei, da $[\hat{L}^2, \hat{H}] = [\hat{S}^2, \hat{H}] = 0$

$$[\hat{J}^2, \hat{H}] = [\hat{L}^2, \hat{H}] + 2[(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}), \hat{H}] + [\hat{S}^2, \hat{H}] = 0 \quad [\hat{J}_z, \hat{H}] = 0$$

Damit ergibt sich ein neuer Satz von Quantenzahlen n, j, m_j, s, l (Quantenzahlen bei Spin-Bahn-Kopplung)

Vektormodell für $J=L+S$

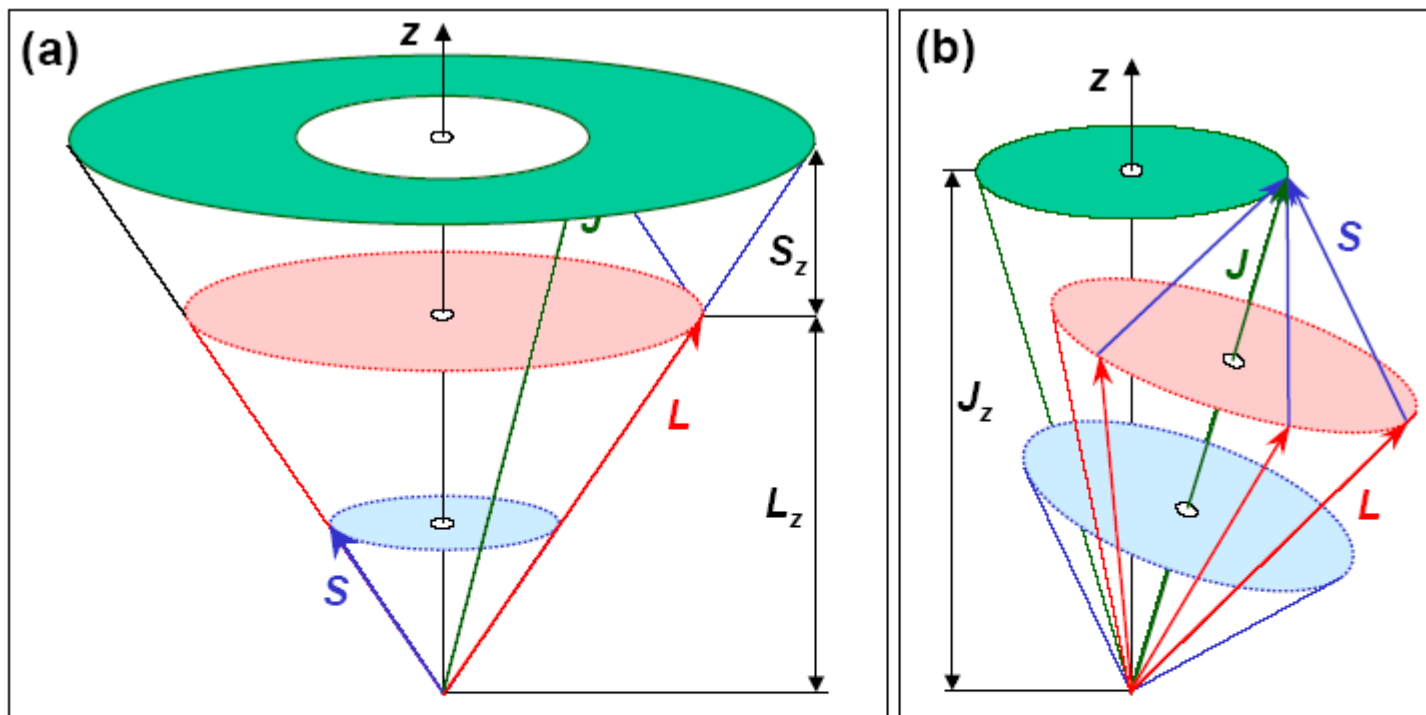
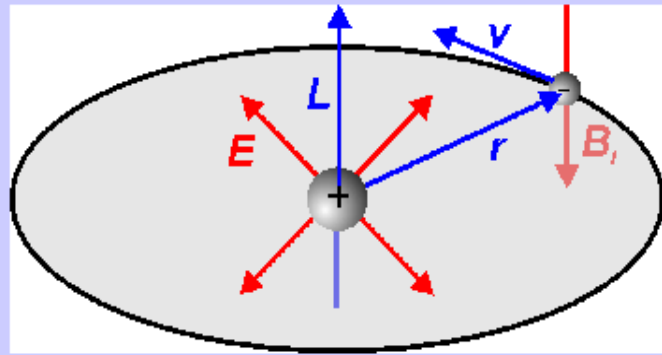


Abbildung 4.3: Vektormodell der Kopplung des Bahndrehimpulses $\mathbf{L}$ und des Spins $\mathbf{S}$ zum Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J}$. In (a) ist der Zustand charakterisiert durch die Quantenzahlen (m, l, s, m_s) und ist damit Eigenzustand zu den Operatoren $\hat{\mathbf{L}}^2$, $\hat{\mathbf{S}}^2$, $\hat{L}_z$ und $\hat{S}_z$. Im Vektormodell kommt dies dadurch zum Ausdruck, dass sowohl $\mathbf{L}$ als auch $\mathbf{S}$ um die z -Achse präzedieren. $\mathbf{J}^2$ ist damit nicht definiert, wohl aber J_z , d.h. der Gesamtdrehimpuls besitzt eine feste Projektion auf die z -Achse. In (b) präzedieren sowohl $\mathbf{L}$ als auch $\mathbf{S}$ um die Richtung des Gesamtdrehimpulses $\mathbf{J}$. Damit ist weder die Projektion von $\mathbf{L}$ noch von $\mathbf{S}$ auf die z -Achse fest, d.h. m und m_s sind keine guten Quantenzahlen mehr. Hingegen ist die Projektion von $\mathbf{J}$ auf die z -Achse fest. Der Zustand kann also durch die Quantenzahlen (j, m_j, l, s) charakterisiert werden.

Zusammenfassung Spin-Bahn-Kopplung

Bohr-Atommodell: Im E -Feld des Kerns bewegtes Elektron sieht B -Feld: ➡

$$B_l = \frac{1}{c^2} \vec{v} \times \vec{E} = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 c^2} \frac{\vec{v} \times \vec{r}}{r^3}$$



Quantenmechanische Rechnung ergibt zusätzlichen **Thomas-Faktor** 1/2. Mit Coulomb-Feld:

$$B_l = -\frac{1}{2} \frac{\mu_0 e}{4\pi m_e r^3} \vec{L}$$

Es folgt die LS-Wechselwirkungsenergie ➡

$$E_{ls} = -\mu_s B_l = \frac{\mu_0 e}{8\pi m_e^2 r^3} \vec{S} \vec{L}$$

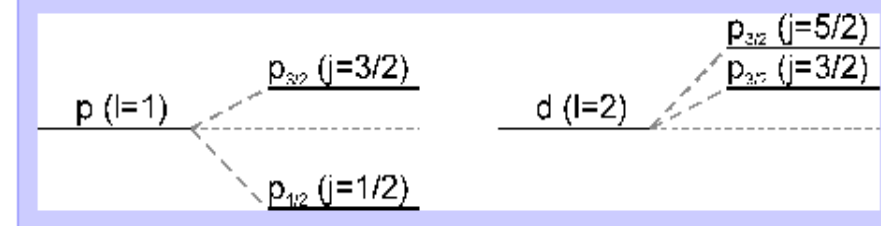
Mit $J^2 = L^2 + S^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S}$ und

$$\langle r^{-3} \rangle = \int r^{-3} |\psi|^2 d^3r$$

folgt eine **Niveaushiftung** um

$$E_{ls} \sim \frac{Z^4 (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1))}{n^3 l(l+1/2)(l+1)}$$

Alle Niveaus außer $l = 0$ spalten in **Doubletten** auf

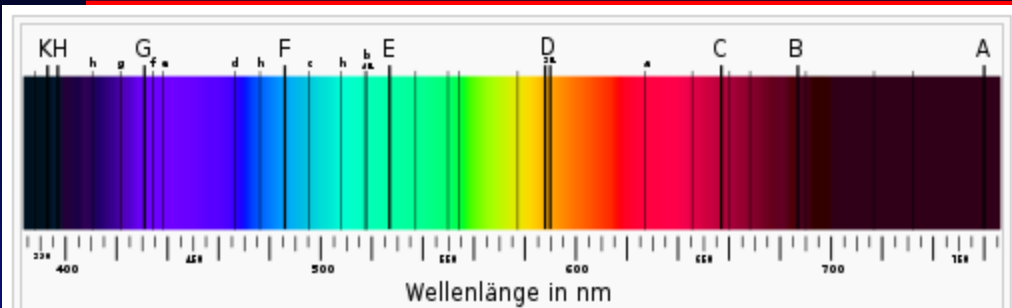


Bei LS-Kopplung wird Zustand durch die Quantenzahlen $n l j m_j$ beschrieben. m_l und m_s sind unbestimmt.

Spektroskopische **Nomenklatur**: $n^{2s+1}l_j$

- ▶ $3^2d_{5/2}$ ($n=3, s=1/2, l=2, j=5/2$)
- ▶ $1^2s_{1/2}$ ($n=1, s=1/2, l=0, j=1/2$)

Fraunhofer-Linien (Absorptionslinien in Sonnenlicht, Bunsenbrenner, usw)



Die wichtigsten Fraunhoferlinien im sichtbaren Bereich des

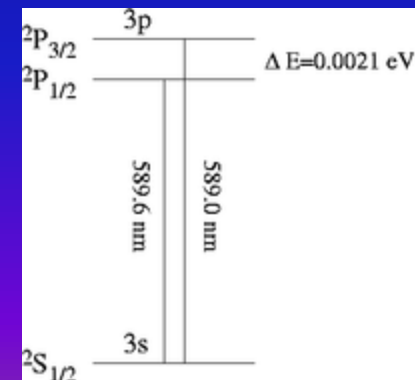
Die wichtigsten Fraunhoferlinien im Überblick

Symbol	Element	Wellenlänge in nm	Symbol	Element	Wellenlänge in nm
y	O ₂	898,765	c	Fe	495,761
Z	O ₂	822,696	F	H β	486,134
A	O ₂	759,370	d	Fe	466,814
B	O ₂	686,719	e	Fe	438,355
C	H α	656,281	G'	H γ	434,047
a	O ₂	627,661	G	Fe	430,790
D ₁	Na	589,594	G	Ca	430,774
D ₂	Na	588,997	h	H δ	410,175

Die Fraunhoferlinien erlauben Rückschlüsse auf die chemische Zusammensetzung und Temperatur der Gasatmosphäre der Sonne und von Sternen.



Gelbe Flamme durch Salz (NaCl) in Flamme



Zusammenfassung der Feinstruktur

1. für s-Terme gilt : $\vec{l} = 0 \rightarrow \vec{j} = \vec{s} \rightarrow V_{L,S} = 0$
2. Niveaus mit größeren QZ j sind energetisch höher
3. $V_{L,S} \propto Z^4 \rightarrow$ daher ist $V_{L,S}^6$ sehr klein beim Wasserstoff $\Delta E \approx 0,33^{-1} \text{cm} \approx$
(mit $E = \vec{\nu} h c, \vec{\nu} = \frac{\nu}{c} = \frac{1}{\lambda} = \text{Wellenzahl}$) $\approx 4, 10^{-5} \text{eV}$ bei H_α , $1 \text{eV} = 8066 \text{cm}^{-1}$
4. Bei Alkali-Atomen ist $V_{L,S}$ jedoch sichtbar :
 $\Delta E = 17,2^{-1} \text{cm} = 2 \cdot 10^{-3} \text{eV} = 6 \text{\AA}$ bei Na-D-Linien

Da die Wellenfunktion des Wasserstoffatoms exakt bestimmt ist, ist eine exakte Berechnung der Feinstruktur erlaubt.

$$E_{n,l,j} = E_{n,l} + E_{rel.} + E_{l,s}$$

Vollständige Berechnung von Dirac:

$$E_{FS} = -\frac{E_n \alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) Z^2$$

$$\left[\left(\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137} \right) \right]$$

Dies entspricht der Sommerfeldschen Berechnung von $E_{rel.}$, wenn man l durch j ersetzt.

	E_{rel}	=	abh. von	l
Bemerkenswert:	$E_{l,s}$	=	abh. von	j, l, s
	E_{FS}^{Dirac}	=	abh. von	j

**Problem: bei Wasserstoff Aufspaltung von $2S_{\frac{1}{2}}$ and $2P_{\frac{1}{2}}$
(entdeckt von Lamb und Retherford) Erklärung: Vakuumpol.**

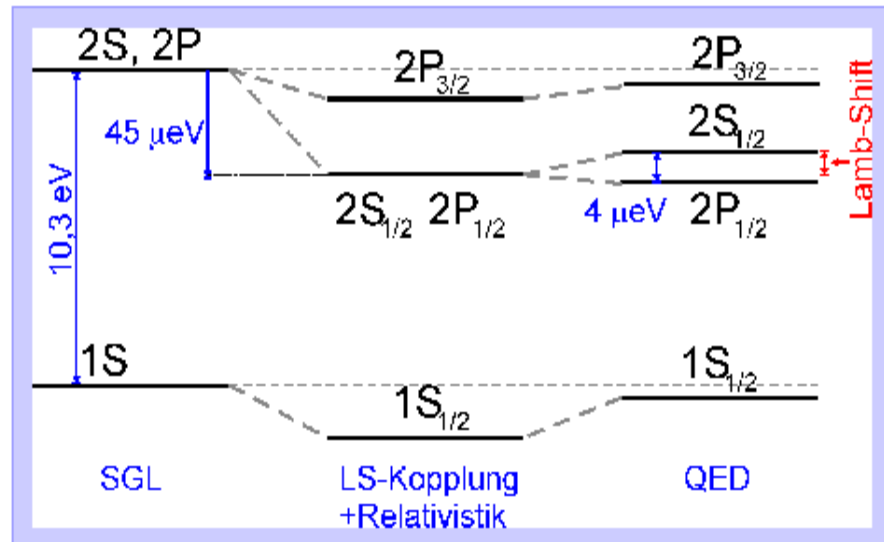
Relativ. Korrekturen und Lamb-Shift

Weitere Korrekturen sind Folge der relativistischen Massezunahme. Aus der relativistischen quantenmechanischen **Dirac-Gleichung** folgt für die **Feinstrukturaufspaltung**

$$E_{nj} = E_n \left(1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{j+1/2} \right) \right)$$

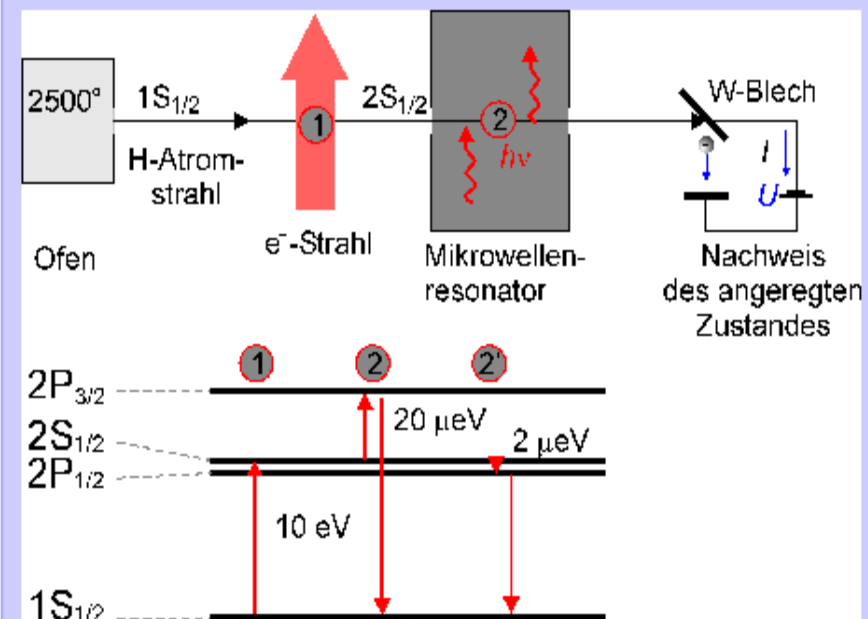
mit der **Sommerfeld-Feinstrukturkonstanten**

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$



Weitere Korrekturen aus der **Quantenelektrodynamik (QED)**: Elektron emittiert und absorbiert im Vakuum ständig Photonen und hat so für kurze Zeit eine veränderte kinetische Energie ($\Delta E \Delta t \geq \hbar$).

Messung der Lamb-Shift 1950



Nachweis des Lamb-Shift: H-Atomstrahl im Grundzustand wird durch Elektronen angeregt. Rückübergang ist wegen $\Delta l = 0$ verboten. Als Nachweis wird beim Auftreffen auf Wolframblech durch Anregungsenergie ein Elektron ausgelöst. Im Mikrowellenresonator wird je nach Frequenz Übergang nach 2P_{3/2} (10 GHz) oder 2P_{1/2} (1 GHz) induziert. Wegen $\Delta l = 1$ geht das H-Atom sofort in Grundzustand über, was durch eine Reduktion des Stromes I nachgewiesen wird.

Lamb-Shift durch QED Korrekturen höherer Ordnung

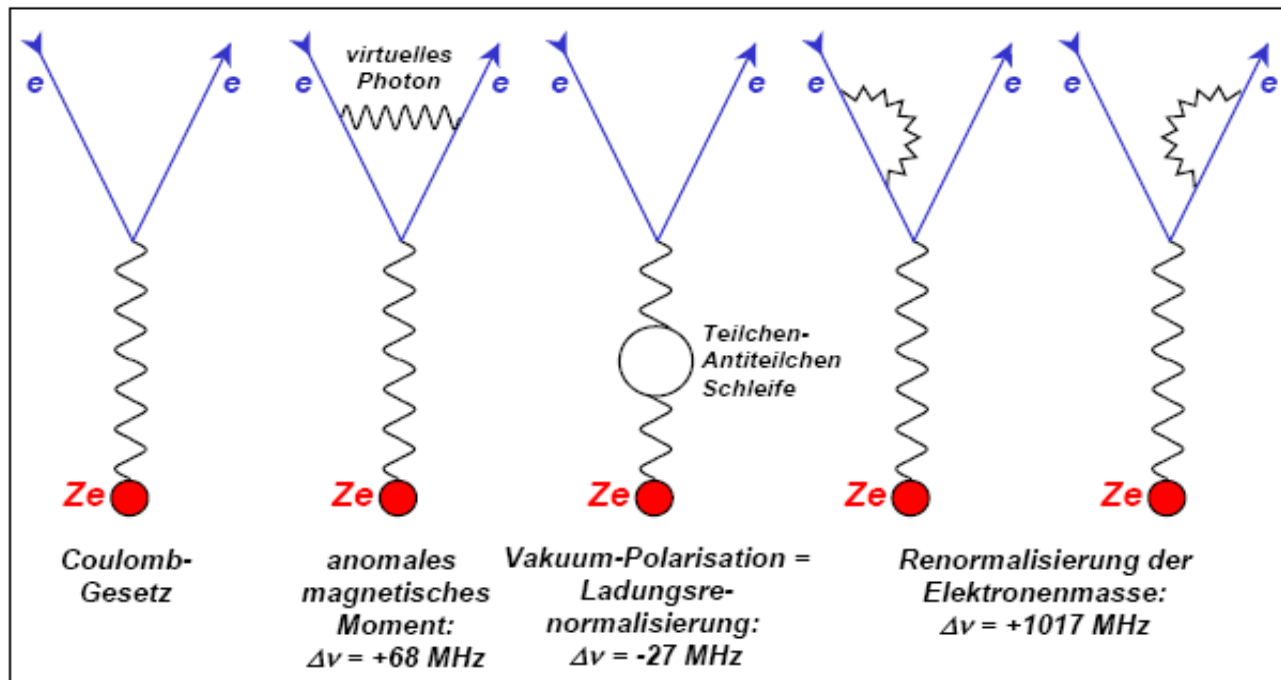


Abbildung 4.5: Feynman-Diagramme, die zur Streuung eines Elektrons an einer statischen Ladung beitragen. Das linke Diagramm entspricht dem uns vertrauten Coulomb-Gesetz. Die weiteren Diagramme sind von der Ordnung α^2 und ziehen eine Renormalisierung des magnetischen Moments, der Ladung und der Masse nach sich. Die Frequenzangaben zu den Diagrammen beziehen sich auf den jeweiligen Beitrag zur Verschiebung des $2s_{1/2}$ - gegenüber dem $2p_{1/2}$ -Niveau. Die Lamb-Verschiebung kann experimentell auf 0.1 MHz genau vermessen werden. Dies erlaubt es, die Beiträge der einzelnen Diagramme getrennt zu verifizieren. Dabei werden Diagramme höherer als der gezeigten Ordnung (2-Schleifen-Beiträge) von Bedeutung. Die eigentliche Grenze bei der theoretischen Vorhersage des Termschemas stellt der nicht exakt behandelbare Einfluss der Protonenstruktur auf die Elektronenfrequenzen dar.

Lamb-Shift

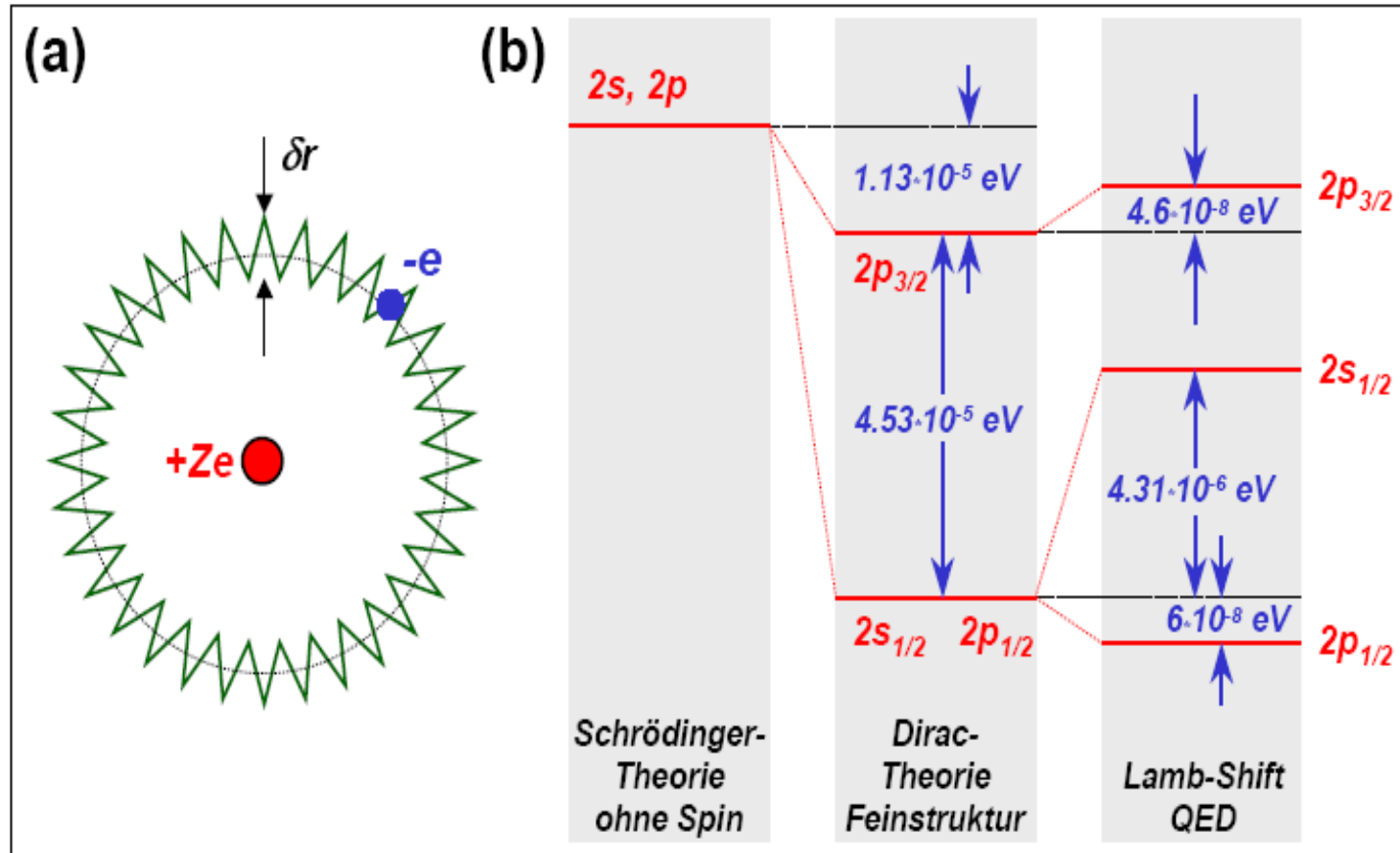
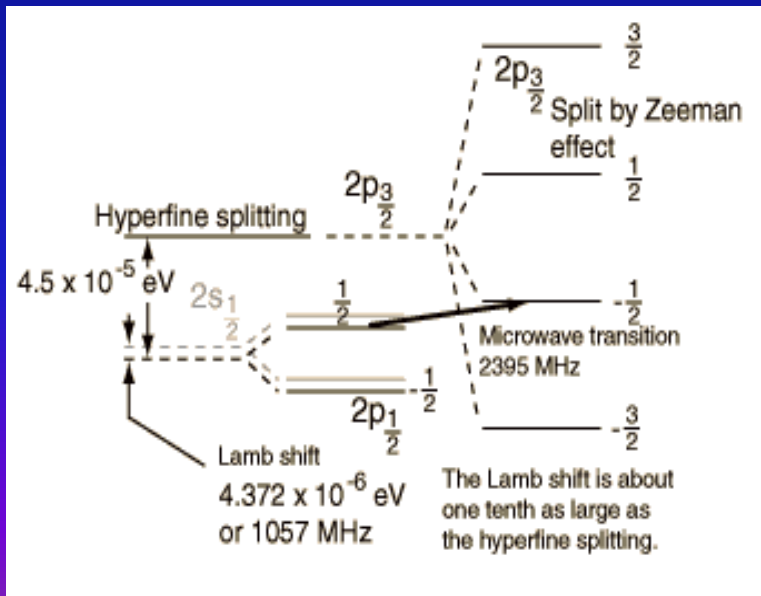


Abbildung 4.6: (a) Zur Veranschaulichung der Zitterbewegung eines Elektrons aufgrund der Emission und Absorption von virtuellen Photonen. (b) Feinstruktur und Lamb-Verschiebung beim Wasserstoffniveau mit $n = 2$.

Lamb-Retherford-Experiment

While the Lamb shift is extremely small and difficult to measure as a splitting in the optical or uv spectral lines, it is possible to make use of transitions directly between the sublevels by going to other regions of the electromagnetic spectrum. Willis Lamb made his measurements of the shift in the microwave region. He formed a beam of hydrogen atoms in the $2s(1/2)$ state. These atoms could not directly take the transition to the $1s(1/2)$ state because of the selection rule which requires the orbital angular momentum to change by 1 unit in a transition. Putting the atoms in a magnetic field to split the levels by the Zeeman effect, he exposed the atoms to microwave radiation at 2395 MHz (not too far from the ordinary microwave oven frequency of 2560 MHz).



Then he varied the magnetic field until that frequency produced transitions from the $2p(1/2)$ to $2p(3/2)$ levels. He could then measure the allowed transition from the $2p(3/2)$ to the $1s(1/2)$ state. He used the results to determine that the zero-magnetic field splitting of these levels correspond to 1057 MHz. By the Planck relationship, this told him that the energy separation was $4.372 \text{ E}^{-6} \text{ eV}$.

Lamb-Retherford-Experiment

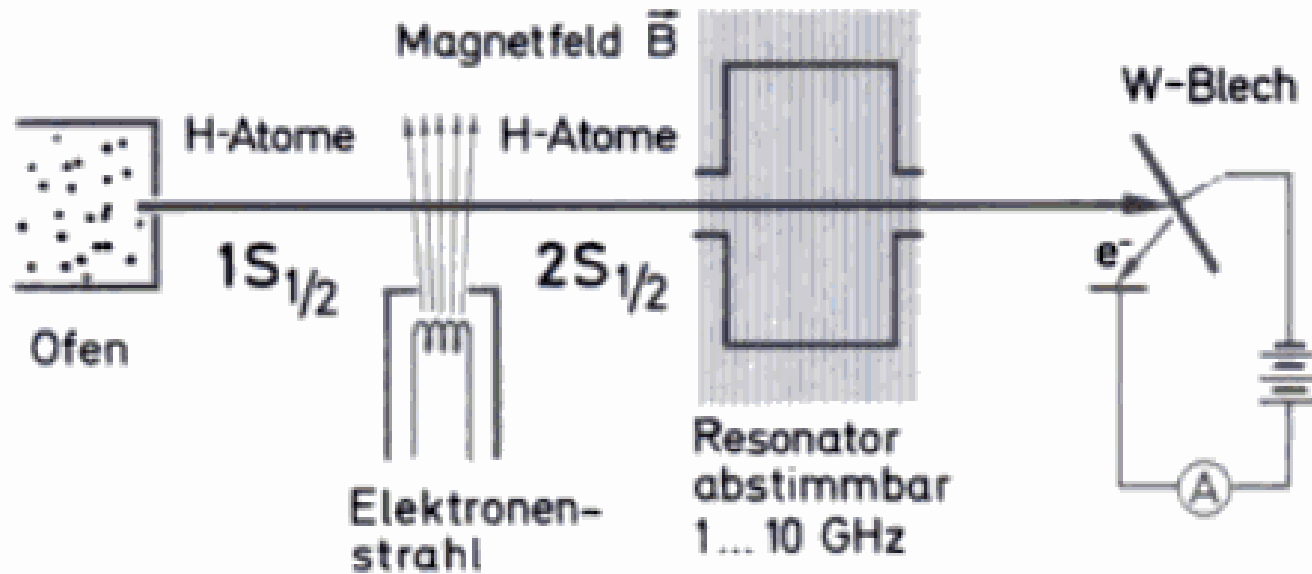


Abb. 12.22. Zur Messung der **Lamb-Verschiebung**: ein Atomstrahl aus H-Atomen wird durch Elektronenbeschuss in den metastabilen $2S_{1/2}$ -Zustand angeregt und durchfliegt so einen Resonator. Wenn dort elektromagnetische Übergänge induziert werden, vermindert sich die Anzahl der im angeregten Zustand auf das als Empfänger dienende Wolfram-Blech treffenden H-Atome und damit der gemessene Elektronenstrom. Das Magnetfeld $\vec{B}$ dient zu einer zusätzlichen energetischen Trennung der Zustände $S_{1/2}$ und $P_{1/2}$. Damit wird eine Mischung dieser Zustände und damit ein unmittelbarer Zerfall über den Zustand $2P_{1/2}$ behindert

Lamb-Retherford-Experiment

Das Experiment von **Lamb** und *Retherford* ist in Abb.12.22 dargestellt. Ein Wasserstoff-Atomstrahl wird durch thermische Dissoziation bei 2500 °C aus H₂-Molekülen erzeugt. Durch Beschuß mit Elektronen wird ein kleiner Teil dieser Atome in den metastabilen Zustand $2^2S_{1/2}$ angeregt. Optische Übergänge zwischen diesem Zustand und dem Grundzustand $1^2S_{1/2}$ sind verboten. Die Atome gelangen dann durch einen abstimmbaren Resonator für Hochfrequenz- bzw. Mikrowellenstrahlung auf ein Wolframblech. Dort können die metastabilen Atome ihre Anregungsenergie abgeben. Sie lösen dabei in der Metalloberfläche Elektronen aus. Man mißt den Elektronenstrom und erhält dadurch ein Maß für die je Zeiteinheit ankommenden Atome im Zustand $2^2S_{1/2}$. – Diejenigen Atome, die im Resonator durch Absorption von Mikrowellenstrahlung im Bereich von 10000 MHz in den Zustand $2^2P_{3/2}$ gehoben werden (vgl. Termschema Abb.12.21) gehen durch Aussenden der H_α-Linie (oder genauer von einer Komponente dieser Linie) in den Grundzustand über. Gleichzeitig nimmt der Elektronenstrom am Wolframblech ab, wenn eine solche Absorption erfolgt. – **Lamb** und *Retherford* fanden 1947, daß der gleiche Effekt, nämlich eine Abnahme des Elektronenstroms, auch bei Absorption oder induzierter Emission von Strahlung einer Frequenz von ca. 1000 MHz im Resonator erfolgte. Dabei handelt es sich um den Übergang aus dem Zustand $2^2S_{1/2}$ in den Zustand $2^2P_{1/2}$.

Lamb-Retherford-Experiment

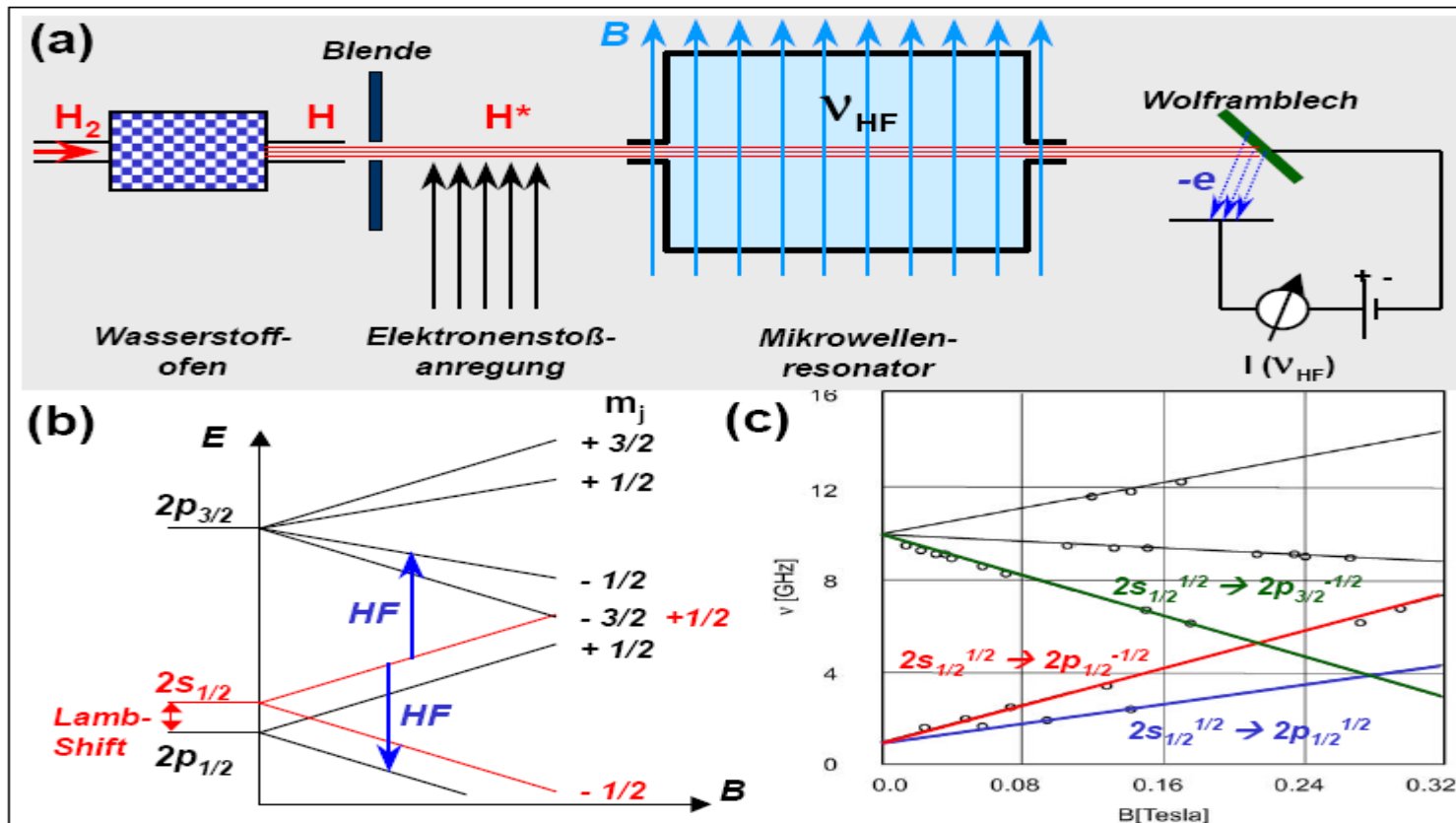


Abbildung 4.7: (a) Lamb-Retherford-Experiment. (b) Zeeman-Aufspaltung der $2s_{1/2}$ -, $2p_{1/2}$ - und $2p_{3/2}$ -Niveaus und ihre Ausnutzung zur Messung der Lamb-Shift. (c) Originaldaten von Lamb und Retherford (Phys. Rev. 79, 549 (1950)) zur Bestimmung der Niveauverschiebung als Funktion des Magnetfelds im $2s/2p$ -System des Wasserstoffs. Die Punkte stellen die Messdaten dar, durchgezogene Linien entsprechen theoretischen Vorhersagen der Dirac-Theorie, wobei die Lamb-Verschiebung zusätzlich berücksichtigt wird. Man stellt fest, dass sich die Linien schon bei relativ schwachen Magnetfeldern kreuzen. Eine klare Trennung von Spin-Bahn-Kopplung und Zeeman-Effekt (siehe Abschnitt 4.6 und 4.7) ist nicht mehr möglich.

Energieniveaus des H-Atoms mit relativ. Korrekturen nach Dirac und Feinstruktur der L.S-Kopplung

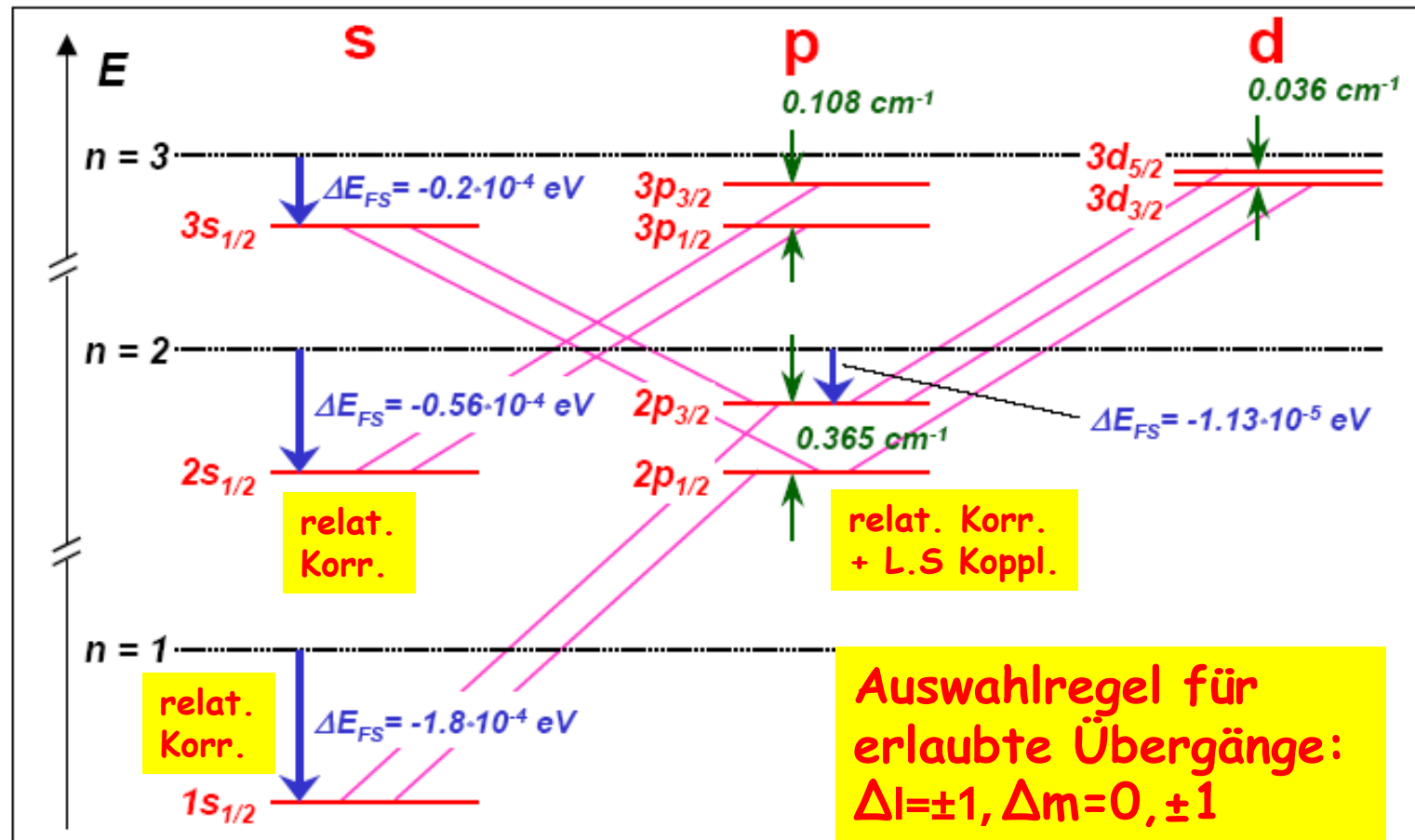


Abbildung 4.4: Termschema des Wasserstoffatoms bei Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung und der relativistischen Massenzunahme. Die gestrichelten Linien geben die Lage der Energieniveaus E_n ohne die Korrekturterme an.

Aufhebung der Entartung bei der Wasserstoff Balmer-Linie H_α

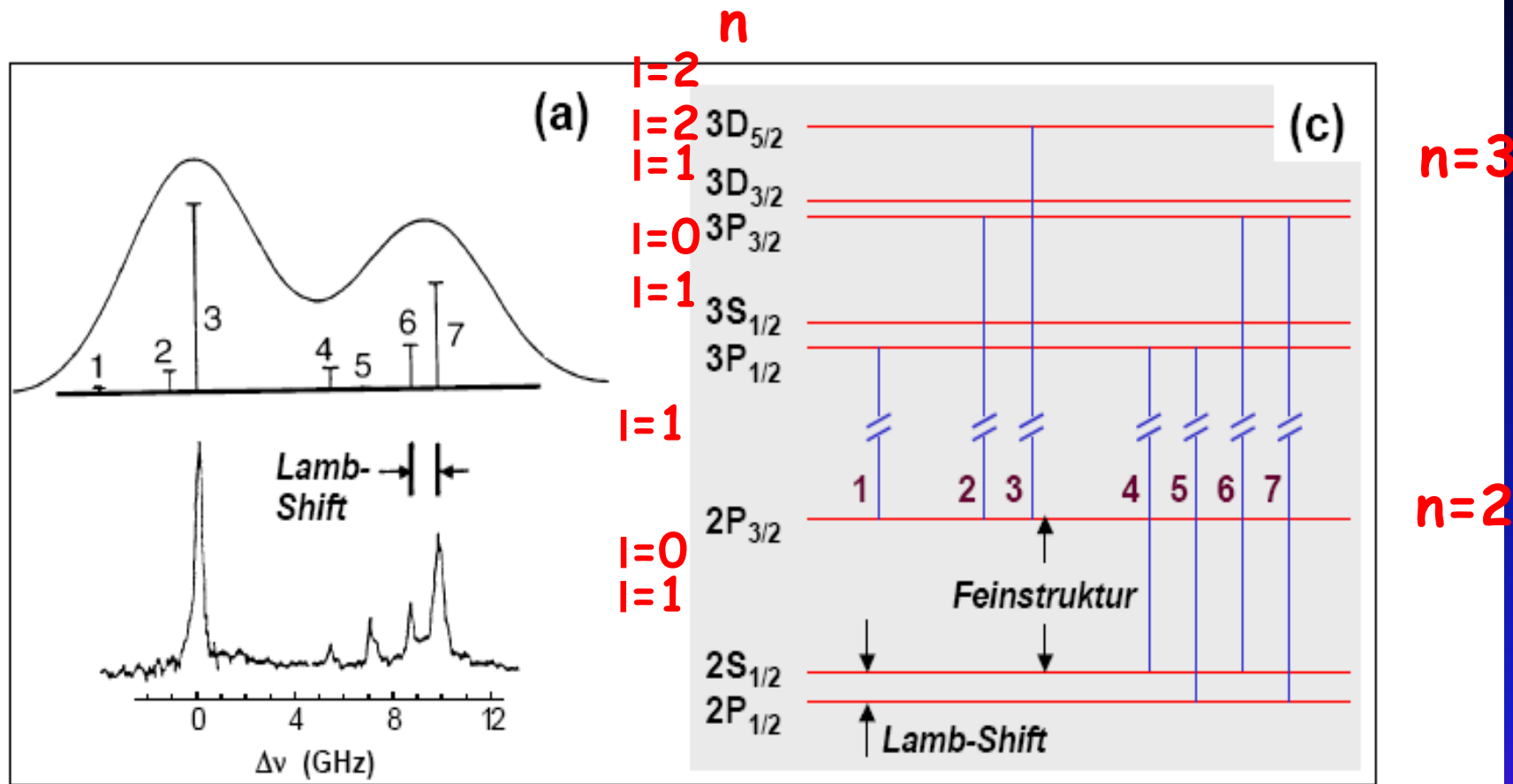


Abbildung 4.1: Feinstruktur der Balmer-Linie H_α gemessen mit (a) hochauflösender Spektroskopie und (b) mit höchstauflösender Laser-Spektroskopie. (c) Verfeinertes Termschema des Wasserstoffs. Die erlaubten Übergänge werden durch die Auswahlregeln bestimmt, die wir erst später diskutieren werden.

Zum Mitnehmen

Bahnbewegung erzeugt magnetisches Moment $p_L \propto L$ zum Drehimpuls L . Da L quantisiert ist, ist p quantisiert. Dies führt zu diskreten Energieniveaus in einem externen Magnetfeld B mit Splitting $m\mu_B B$ wobei μ_B das Bohrmagneton ist. Splitting entdeckt von Zeeman.

Zusätzlich zu diesem magnetischen Moment durch die Bahnbewegung erzeugt das Elektron auch ein magnetisches Moment durch sein Eigendrehimpuls oder Spin S mit $p_S \propto S$.

Bahndrehimpuls L und Spin bilden Gesamtdrehimpuls $J=L+S$, dessen z -Komponente wieder quantisiert ist $\rightarrow$ magnetische QZ m_j . L und S präzessieren um J und daher tun die „Kompassnadel“ p_L und p_S dies auch

Spin hat g -Faktor = 2, d.h. Eigendrehimpuls ist zweimal so effektiv als Bahndrehimpuls um magnetisches Moment zu erzeugen (klassisch nicht erklärbar, folgt jedoch aus relativ. Wellen-Gleichung (DIRAC-Gleichung))

Energieniveaus nur abhängig von Gesamtdrehimpuls-QZ j , wenn man sehr kleine höhere Ordnung Korrekturen (Lamb-Shift) weglässt. Lamb-Shift sehr genau gemessen $\rightarrow$ sehr guter Check für Quantenelektrodynamik QED.