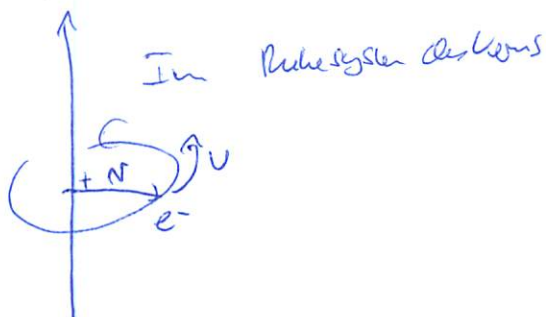


81

Spin - Bahn Kopplung

$$V_{ES} = \mu_B \vec{\sigma} = \mu_B^2 \cdot \frac{\vec{S}}{\hbar} \cdot \vec{B}_e$$

$\vec{B}_e$ Magnetfeld des Elektronenkreisstroms für $l=0$



Strom $I = \frac{q}{T}$ $T = 2\pi r / v$

$$\Rightarrow B_e = + \frac{e \mu_0}{4\pi r^3} (\vec{v} \times (-\vec{r}))$$

$$= - \frac{e \mu_0}{4\pi r^3} \vec{v} \times \vec{r}$$

$$\vec{L} = \vec{v} \times \vec{r} \cdot m$$

$$\Rightarrow B_e = \frac{e \mu_0}{4\pi r^3 m_e} \vec{L}_e$$

$$\Rightarrow V_{ES} = \frac{e^2 \mu_0}{8\pi m_e} \frac{\vec{L} \cdot \vec{S}}{r^3} = \frac{e^2 \mu_0 \hbar^2}{8\pi m_e^2 r^3} \frac{\vec{L} \cdot \vec{S}}{\hbar^2} = \frac{2 \cdot e^2 \mu_0}{2m_e} \frac{\vec{L} \cdot \vec{S}}{4\pi r^3 m_e}$$

~~oder~~

$$\Rightarrow V_{ES} = \frac{e^2 \mu_0}{8\pi m_e^2 r^3} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

(inklusive Thomasfaktor)

82

V_{LS} muss als zusätzliches Potential in die Schrödingergleichung aufgenommen werden.

Typische Werte in H-Atom

$$B_L \approx 1 \text{ T} \rightarrow V_{LS} \approx 10^{-9} \text{ eV}$$

(Klassische Rechnung im Bohrschen Atommodell)

→ keine Korrektur.

End U.
mm

Spin präzediert im Magnetfeld des Bahndrehimpulses (und umgekehrt)

Spin-Bahn Kopplung

Solange $\vec{L}$ nur mit den Ortskoordinaten und $\vec{S}$ nur mit den Spinkoordinaten verknüpft ist, lassen sie sich in der Schrödingergleichung separieren, d.h. ausgedreht, $\vec{L}$ und $\vec{S}$ sind Erhaltungsgrößen.

V_{LS} enthält aber beide Größen, die von r abhängen und dem Spin.

→ $\vec{L}$ und $\vec{S}$ sind keine Erhaltungsgrößen in klassischer WZ

~~$(\vec{L} \cdot \vec{H}) \neq 0$ $(\vec{S} \cdot \vec{H}) \neq 0$~~ wegen $\vec{L} \cdot \vec{S} \neq 0$ also
 ~~$[L_x, S_x, S_y] \neq 0$~~
und analog für L

Der Gesamtdrehimpuls ist aber erhalten!

85

direkt beweis:

$$[\hat{\vec{L}}^2, H] = [\hat{\vec{L}}^2, H_0 + \frac{\alpha \vec{L} \cdot \vec{S}}{r^3}] = [\hat{\vec{L}}^2, \frac{\alpha \vec{L} \cdot \vec{S}}{r^3}] \quad 41$$

~~W~~

$\hat{\vec{L}}^2$ und $\frac{1}{r^3}$ kommutieren (Zentralkörperproblem)

oder $[\hat{\vec{L}}^2, \frac{1}{r}] = 0$ aus Wellenfunktion
 $(\hat{\vec{L}}^2 \frac{1}{r^3} - \frac{1}{r^3} \hat{\vec{L}}^2) = 0$

$$= \hat{\vec{L}}^2 \frac{\alpha \vec{L} \cdot \vec{S}}{r^3} - \frac{\alpha \vec{L} \cdot \vec{S}}{r^3} \hat{\vec{L}}^2$$

$$= \frac{\alpha}{r^3} (\hat{\vec{L}}^2 \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} - \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} \hat{\vec{L}}^2)$$

$\hat{\vec{L}}$ und $\hat{\vec{S}}$ vertauschen,
 da sie auf unterschiedlichen
 Teilen der Wellenfunktion agieren

$$= \frac{\alpha}{r^3} (\hat{\vec{L}} \hat{\vec{L}} \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} - \hat{\vec{S}} \hat{\vec{L}} \hat{\vec{L}} \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}) = 0$$

analog für $\hat{\vec{S}}^2$

d.h. $\hat{\vec{L}}^2$ und $\hat{\vec{S}}^2$ vertauschen mit V_{LS} und H .

Wie können sie beide Schwef messen.

Aber $\hat{L}_x$ und $\hat{S}_z$ vertauschen nicht mit V_{LS}

Beweis für $\hat{\vec{S}}$

$$\left[\frac{\alpha}{r^3} (\hat{L}_x \hat{S}_x + \hat{L}_y \hat{S}_y + \hat{L}_z \hat{S}_z), \hat{S}_z \right]$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\neq 0} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{= 0}$

*
 Siehe auch
 nächste S.!

66

Als für $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ gilt

$$H = H_0 + V_{LS}$$

$$[\vec{J}^2, H] = 0 \quad \text{und} \quad [\hat{J}_z, H] = 0$$

$$\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$$

$$[\hat{L}_z, H_0] = 0 \quad [\hat{S}_z, H_0] = 0 \quad \Rightarrow [\hat{J}_z, H_0] = 0$$

$$[\hat{J}_z, \hat{L}_x \hat{S}_x + \hat{L}_y \hat{S}_y + \hat{L}_z \hat{S}_z]$$

$$[L_z, L_z] = 0 \quad [L, S] = 0$$

$$= [\hat{L}_z + \hat{S}_z, \hat{L}_x \hat{S}_x + \hat{L}_y \hat{S}_y]$$

$$= [\hat{L}_z, \hat{L}_x] \hat{S}_x + [\hat{L}_z, \hat{L}_y] \hat{S}_y + \hat{L}_x [\hat{S}_z, \hat{S}_x] + \hat{L}_y [\hat{S}_z, \hat{S}_y]$$

$$= i\hbar \hat{L}_y \hat{S}_x - i\hbar \hat{L}_x \hat{S}_y + \hat{L}_x \cdot i\hbar \hat{S}_y + \hat{L}_y \cdot (-i\hbar \hat{S}_x)$$

$$= i\hbar (\hat{L}_y \hat{S}_x - \hat{L}_x \hat{S}_y + \hat{L}_x \hat{S}_y - \hat{L}_y \hat{S}_x) = 0$$

ähnliche Rechnung liefert ...

$$[\vec{J}^2, H] = 0$$

$$\text{Add: } m_j = m_l + m_s$$

↑ ↑ ↑
Schwefel Helium Helium

Also: Quantisierung des Wasserstoffspintrons

Es gibt 2 Konstruktionen, um das selbe

$$n = 1, 2, \dots$$

$$l = 0, 1, 2 \quad \text{genau: } \langle \vec{L}^2 \rangle = \hbar^2 (l(l+1))$$

$$s = 1/2 \quad \text{genau: } \langle \vec{S}^2 \rangle = \hbar^2 (1/2(1/2+1))$$

$$j = l \pm s \quad \text{genau: } \langle \vec{J}^2 \rangle = \hbar^2 (j(j+1)) \quad \text{mit } j = l \pm 1/2$$

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

m_j Zahlen

$$m_j = m_l + 1/2 \quad \text{oder } m_l - 1/2$$

$$\text{z.B.: } l=1 \quad m_j = 1/2 = 1 - 1/2 \quad \text{oder } 0 + 1/2$$

(25)

Die Feinstruktur

$$V_{\text{es}} = \frac{e^2 \mu_0}{4\pi m_e^2 \hbar^2} \frac{\vec{L} \cdot \vec{S}}{\hbar^2} \approx 10^{-4} \text{ eV}$$

ist eine kleine Energiekorrektur

Zwei ~~Schritt~~ HamiltonianenExakt ist $H = H_0 + V_{\text{es}}$ nicht einfach zu lösen.Wir wollen eine Methode für kleine Störungen von H_0

$$H = H_0 + \lambda H' \quad 0 \leq \lambda \leq 1 \quad H' : \text{Störung}$$

Wenn $\lambda = 0$ kann man zur ursprünglichen Lösung von H_0 mit Energien E_n und Eigenfunktionen u_n

$$H u_n = E_n u_n \quad H_0 u_n = E_n u_n$$

$$\text{also für } \lambda \rightarrow 0 \quad u_n \rightarrow u_n, \quad E_n \rightarrow E_n$$

$$\text{Störungsansatz: } u_n = u_n + \lambda u_n^{(1)} + \lambda^2 u_n^{(2)} + \dots \quad \leftarrow \text{wegen des Störungsansatzes}$$

$$E_n = E_n + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)}$$

 $u_n^{(k)}$ und $E_n^{(k)}$ sind gesuchte Korrekturenzu u_n und E_n

$$\text{Also } (H_0 + \lambda H') (u_n + \lambda u_n^{(1)} + \dots) = (E_n + \lambda E_n^{(1)} + \dots) (u_n + \lambda u_n^{(1)} + \dots)$$

gilt für beliebigen Wert von $\lambda \Rightarrow$ Koeffizienten in jeder Ordnung von λ müssen die Gleichung unabhängig voneinander erfüllen.Schrittweise macht Potenzen von λ nicht!

86

$$H_0 u_n = \epsilon_n u_n$$

(2⁰)

ungestörte Schrödinger-Gleichung

$$H_0 u_n^{(1)} + H' u_n = \epsilon_n u_n^{(1)} + \epsilon_n^{(1)} u_n \quad (2^1)$$

$$\text{oder } H_0 |u_n^{(1)}\rangle + H' |u_n\rangle = \epsilon_n |u_n^{(1)}\rangle + \epsilon_n^{(1)} |u_n\rangle \quad \cdot \langle u_n^* |$$

$$\langle u_n | H_0 | u_n^{(1)} \rangle + \langle u_n | H' | u_n \rangle = \langle u_n | \epsilon_n | u_n^{(1)} \rangle + \langle u_n | \epsilon_n^{(1)} | u_n \rangle$$

↓

$$\langle u_n^{(1)} | H_0 | u_n \rangle^*$$

$$\downarrow$$

$$\cancel{\langle u_n | u_n \rangle}$$

$$\langle u_n^{(1)} | \epsilon_n | u_n \rangle^*$$

$$\downarrow$$

$$\langle u_n | \epsilon_n | u_n^{(1)} \rangle$$

$$\Rightarrow \langle u_n | H' | u_n \rangle = \epsilon_n^{(1)} \underbrace{\langle u_n | u_n \rangle}_{\delta_{nn}} = \epsilon_n^{(1)}$$

$$\text{Also } \epsilon_n^{(1)} = \langle u_n | H' | u_n \rangle$$

ist die Energiekorrektur
in 1. Ordnung Störrechnung!

$$\text{Also } E_n \approx \epsilon_n + \epsilon_n^{(1)} + \dots$$

In der 0. Ordnung Störrechnung werden alle Zustände berücksichtigt,
da die Energie weder korrigiert um $\langle u_n | H' | u_n \rangle$