Vorlesungen: Christian Sämann & Kisten Vogeler
Übung: Michael Flohr
Übungsleitung: Kirsten Vogeler

Die Spin-Bahn-Kopplung

(Abgabe: 24.01.2006)

Dieses Aufgabenblatt stellt die wichtigste Korrektur im Spektrum des Wasserstoffatoms vor, die Spin-Bahn-Kopplung. Bisher haben wir das Wasserstoffatom ohne Berücksichtigung des Spins des Elektrons behandelt. Ohne die Spin-Bahn-Kopplung lautet der Hamiltonoperator

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}\,, \qquad m = \text{reduzierte Masse des Elektrons}\,, \qquad r = \text{Abstand Elektron zum Kern}\,.$$

Wie wir in der Vorlesung gelernt haben, sind die stationären Lösungen gegeben durch

$$\langle\vec{r}|n,\ell,m,s,m_s\rangle = R_{n\ell}(r)Y_\ell^m(\theta,\varphi)\chi_{m_s}\,, \qquad s = \frac{1}{2}\,, \qquad \chi_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\ \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix},$$

mit Energie-Eigenwerten $E_n = -\frac{E_I}{n^2}$, $E_I = \frac{me^4}{2\hbar^2} \approx 13.6\,\text{eV}$. Der Spin des Elektrons geht also nur trivial ein.

32. *Motivation der Spin-Bahn-Kopplung*: Das Elektron sieht den geladenen Kern um sich kreisen, was einen Strom darstellt, der ein Magnetfeld induziert. Begründe, dass das Magnetfeld proportional zu $-\frac{e}{r^3}(\vec{v}\times\vec{r})$ ist, wobei $\vec{v}$ die Geschwindigkeit ist, mit der der Kern um das Elektron kreist. Warum kann $\vec{v} = \vec{p}/m$ geschrieben werden? Drücke damit das Magentfeld durch den Drehimpuls aus. (3 P.)

33. *Der Störterm*: Der Spin des Elektrons geht mit einem magnetischen Moment einher, das von der Form $\vec{\mu_s} = -\frac{\mu_B}{\hbar}g\vec{S}$ ist. Alles zusammengenommen führt dies zu dem Störterm $H' = \frac{1}{2m^2c^2}\,\frac{e^2}{r^3}\,\vec{L}\cdot\vec{S}$. Schlage in der Literatur das Bohrsche Magneton μ_B und das gyromagnetische Moment g des Elektrons nach. Überprüfe, dass damit $H' = \left(-\frac{\mu_B}{\hbar}g\right)\left(-\frac{e\mu_0}{8\pi r^3}\right)\frac{1}{m}\vec{L}\cdot\vec{S}$ ist. Wie groß ist μ_B in eV/Tesla? Schätze die Größe der Korrektur (in eV) ab, indem mit $r = a_0 = \frac{\hbar}{me^2}$, dem Bohrschen Radius, das auftretende Magentfeld abgeschätzt wird. Anmerkung: Wer genau hinsieht, stellt fest, dass in H' ein zusätzlicher Faktor 1/2 auftritt. Dies ist der Thomas-Faktor, der sich nur durch eine genaue relativistische Rechnung begründen läßt. (2 P.)

34. *Diagonalisieren*: Damit wir die Störungstheorie aus der Vorlesung anwenden können, müssen wir eine Basis finden, in der H_0 und H' diagonal sind. Zur Vereinfachung der Notation schreiben wir ab jetzt $H' = \chi\frac{1}{r^3}\vec{L}\cdot\vec{S}$. Wir führen den Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ ein. Zeige, dass die J_k, $k = 1,2,3$, die Drehimpulsalgebra erfüllen, wenn jeweils die L_k und die S_k die Drehimpulsalgebra erfüllen. Drücke den Term $\vec{L}\cdot\vec{S}$ allein durch J^2, L^2 und S^2 aus. Gib einen möglichst großen Satz von Operatoren an, die alle miteinander vertauschen, und der H_0 und das umgeschriebene H' enthält. Wie sind die Eigenwerte von J_3 gegeben? (3 P.)

35. *Die neue Basis*: Mit der obigen Überlegung bietet sich nun die neue Basis $|n,\ell,s,j,m_j\rangle$ statt der alten Basis $|n,\ell,m,s,m_s\rangle$ an. Die Umrechnung erfolg via

$$|n,\ell,s,j,m_j\rangle = \sum_{m,m_s}\langle\ell,m,s,m_s|\ell,s,j,m_j\rangle\,|n,\ell,m,s,m_s\rangle\,,$$

wobei die Entwicklungskoeffizienten Clebsh-Gordon-Koeffizienten heißen. Es ist $s = 1/2$ und $m_s = \pm 1/2$. Betrachte $\ell = 1$ und finde explizit die Basis $|\ell,s,j,m_j\rangle$ ausgedrückt durch

Linearkombinationen der Zustände $|\ell, m, s, m_s\rangle = |\ell, m\rangle|s, m_s\rangle$. Tipp: Lege zunächst eine Tabelle mit den möglichen Werten von m, m_s und m_j an und überlege, welche Derhimpulse j jeweils erlaubt sind. Finde eindeutige Zustände und verwende Ab- bzw. Aufsteigeoperatoren $J_\pm = L_\pm + S_\pm$. (3 P.)

36. *Wasserstoffatom*: Gebe in erster Ordnung Störungstheorie die Energie-Korrektur $E_n^{(1)}$ für die Spin-Bahn-Kopplung H' an. Hinweis: Wenn vorher richtig gerechnet wurde, sollten die zu berechnenden Matrixelemente

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \langle n, l, s, j, m_j|\chi\frac{1}{r^3}(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)|n, l, s, j, m_j\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2m^2c^2}\frac{e^2}{2}\langle\frac{1}{r^3}\rangle\,(j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)) \end{aligned}$$

sein. Vergleiche die Ergebnisse für $\ell = 1$ und die beiden möglichen Werte für j. Wie wird also die Linie des $2p$ Zustandes aufgespalten? (Der Erwartungswert von r^{-3} braucht hier nicht berechnet zu werden.) (3 P.)

37. *Bonus*: Wer will, kann versuchen, den noch verbleibenden Erwartungswert $\langle n, \ell, m|\frac{1}{r^3}|n, \ell, m\rangle$ zu bestimmen. Das Ergebnis ist $\frac{a_0^3}{n^3}\left[\ell(\ell+1)(\ell+\frac{1}{2})\right]^{-1}$. (+3 P.)