

VL12. Spin-Bahn-Kopplung (I)

12.1 Bahnmagnetismus (Zeeman-Effekt)

12.2 Spinmagnetismus (Stern-Gerlach-Versuch)

VL13. Spin-Bahn-Kopplung (II)

13.1. Landé-Faktor (Einstein-deHaas Effekt)

13.2. Berechnung des Landé-Faktors

13.3. Anomaler Zeeman-Effekt

VL14. Spin-Bahn-Kopplung (III)

14.1. Spin-Bahn-Kopplung

14.2. Paschen-Back Effekt

Vorlesung 14:

Roter Faden:

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

Folien auf dem Web:

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

Siehe auch: Demtröder, Experimentalphysik 3, Springer-Verlag

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

Zusammenfassung Elektronspin

Eigenschaften des Elektrons:

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

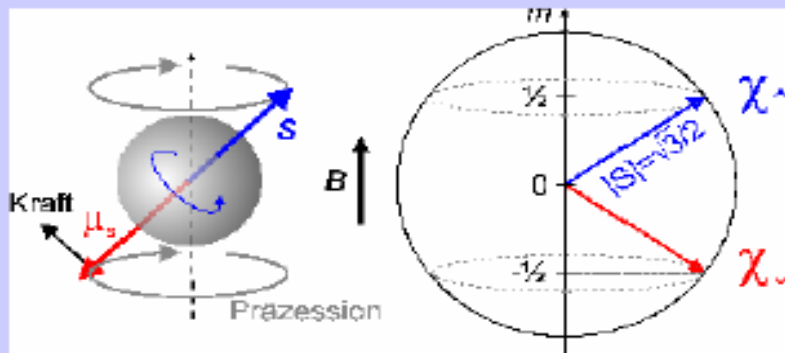
Magnetisches Moment des Elektrons

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

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

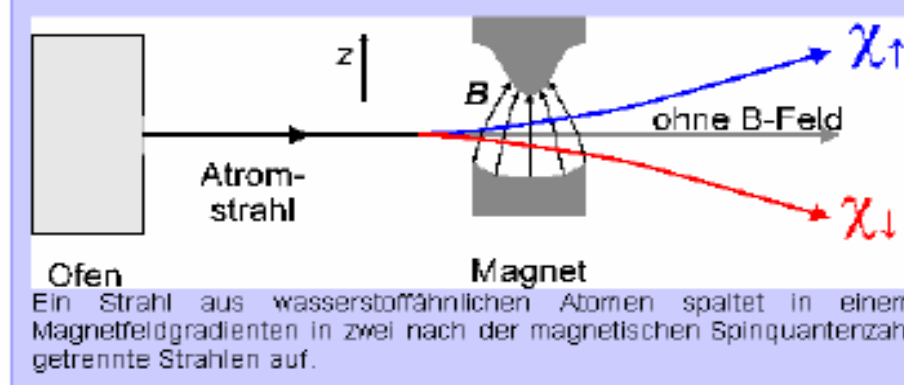
Die Wellenfunktion des Elektrons im H-Atom wird um den Spinanteil χ ergänzt, die nur 2 Werte annimmt

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



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



Erklärung

auf magnetisches Moment wirkt die Kraft

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

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

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

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

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

Der anomale Zeeman-Effekt (mit Spin = Normalfall!)

Gesamt magnetisches Moment aus Spin und Bahnanteil:

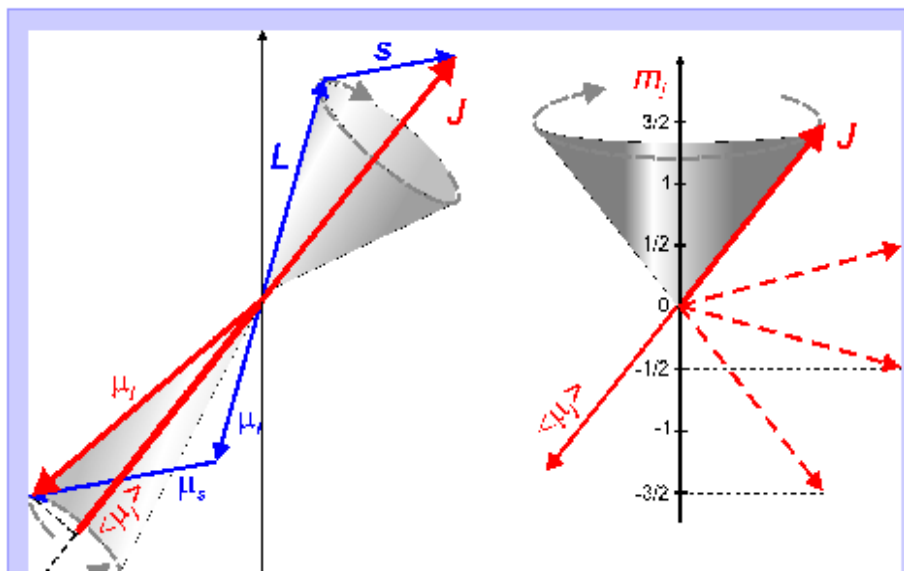
$$\vec{\mu}_j = -\frac{e}{2m_e} (\vec{L} + g_s \vec{S})$$

Wegen Präzession um \mathbf{J} ist nur die Projektion relevant

$$\langle \vec{\mu}_j \rangle = \frac{\vec{\mu}_j \cdot \vec{J}}{J} = g_j \mu_B J / \hbar$$

mit dem Landé-Faktor

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$



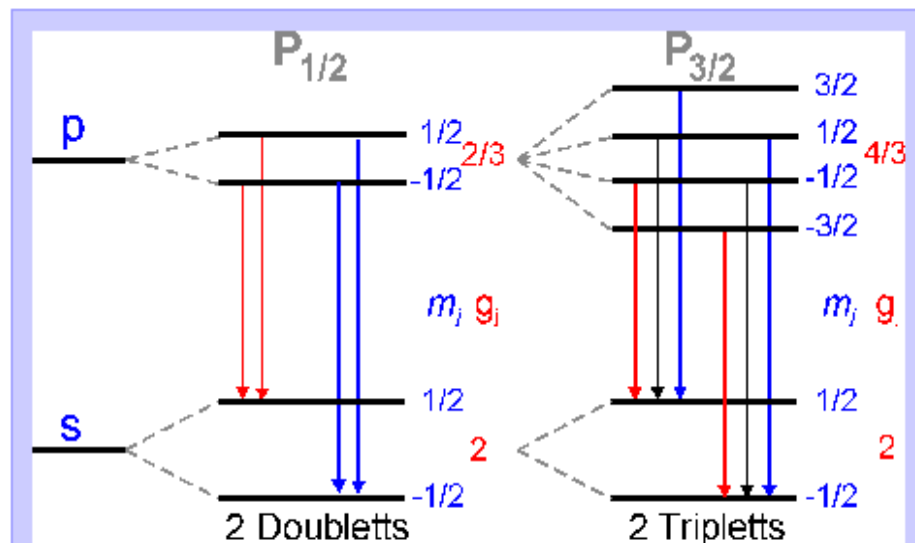
Linienaufspaltung im Magnetfeld analog zu

$$E_{m_j} = -\langle \vec{\mu}_j \rangle \cdot \vec{B} = \mu_B g_j m_j B$$

wegen g_j hängt die Aufspaltung von j ab.

Beispiele:

- ▶ $s=0, j=l \Rightarrow g_j=1$
- ▶ $l=0, j=s \Rightarrow g_j=2$
- ▶ $l=1, j=1/2 \Rightarrow g_j=2/3$
- ▶ $l=1, j=3/2 \Rightarrow g_j=4/3$



Anomaler Zeeman-Effekt durch Aufspaltung von Linien durch externes Magnetfeld (vgl. Auswahlregel für Übergänge gelten nach .

Anomaler Zeeman-Effekt in Wasserstoff für $n=2$

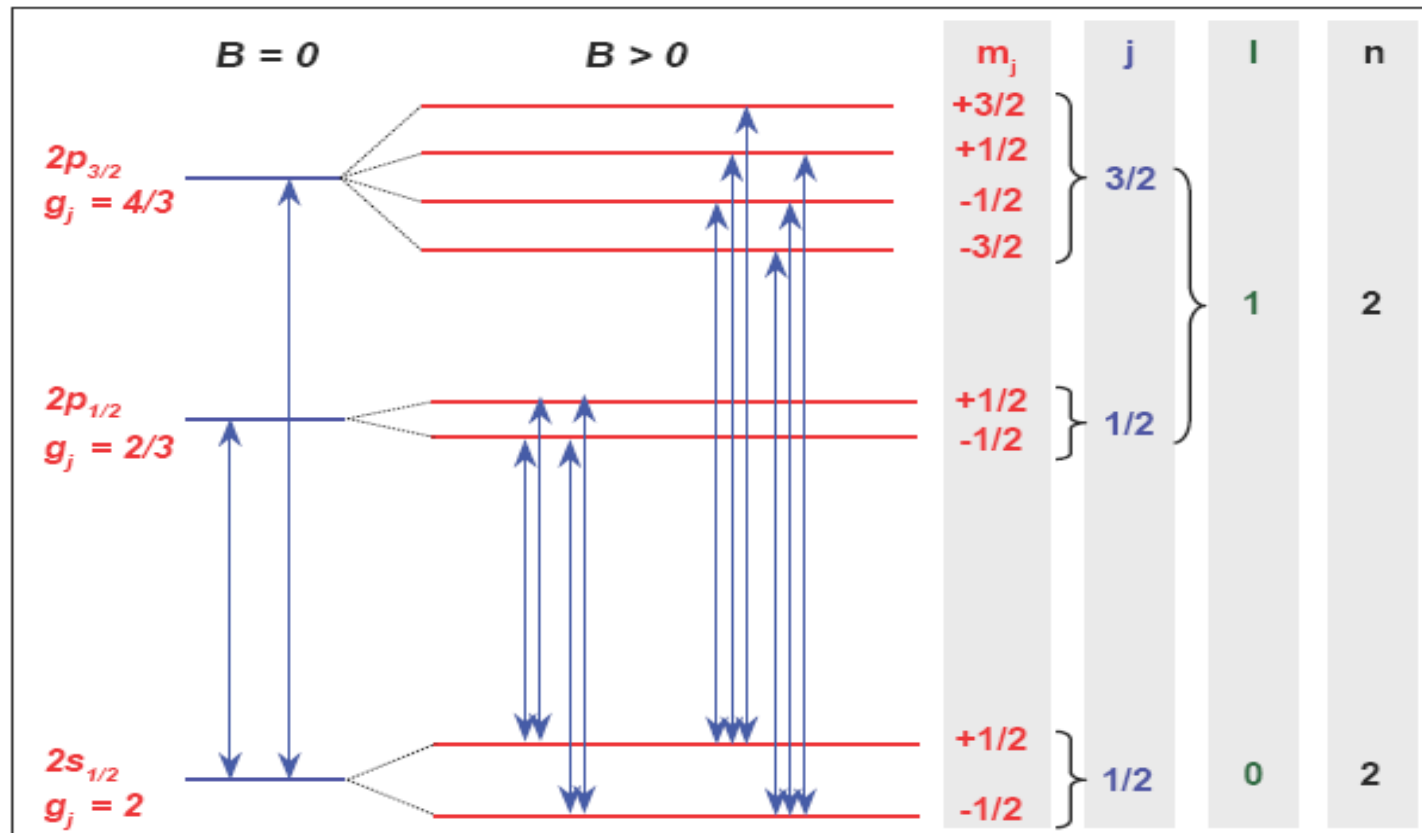


Abbildung 4.16: Zeeman-Aufspaltung für die Zustände $1s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ und $2p_{3/2}$ des Wasserstoffs.

Da der Landé-Faktor g_j vom Zustand (j, l) abhängt, ist die Aufspaltung für Niveaus mit unterschiedlichen Quantenzahlen (j, l) im Gegensatz zum normalen Zeeman-Effekt verschieden. Das Aufspaltungsbild ist somit beim anomalen Zeeman-Effekt komplizierter.

Spin-Bahn Kopplung

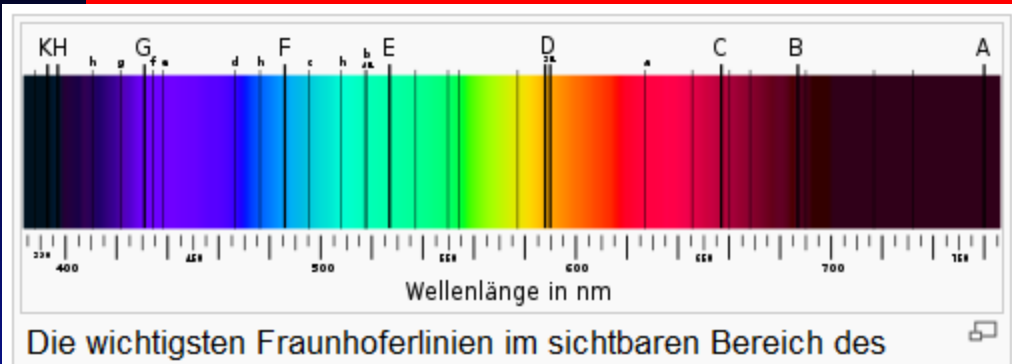
Spin-Bahn Kopplung: der Spin richtet sich im Magnetfeld der Bahnbewegung. Die zwei Ausrichtungen des Spins \Rightarrow Dubletts in den Spektren, z.B. bei Na D-Linien.

Die Spin-Bahn-Kopplung ergibt sich aus der Dirac-Gleichung, aber sie lässt sich anschaulich in einem semiklassischen Modell begründen.

Im Ruhesystem des Elektrons bewegt sich der Kern um das Elektron. Diese Bahnbewegung stellt aufgrund der Ladung des Kerns einen Kreisstrom dar, welcher nach dem Gesetz von Biot-Savart zu einem Magnetfeld führt.

Dieses interne Magnetfeld führt auch zu einem „internen“ Zeeman-Effekt: das magnetische Moment des Elektronenspins koppelt an das magnetische Feld des Kerns, so dass für eine Spinrichtung die Energie erhöht und für die andere Spinrichtung die Energie verringert wird. Da hierdurch ein einzelnes Niveau wegen der zwei möglichen Spinrichtungen in zwei Niveaus aufgespalten wird, gibt es zwei gegenüber der ursprünglichen Lage leicht verschobene Linien in den Spektren der Elemente, bei denen bei grober Betrachtung nur eine sichtbar ist.

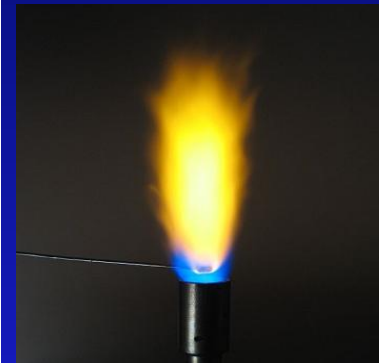
Fraunhofer-Linien (Absorptionslinien in Sonnenlicht, Bunsenbrenner, usw)



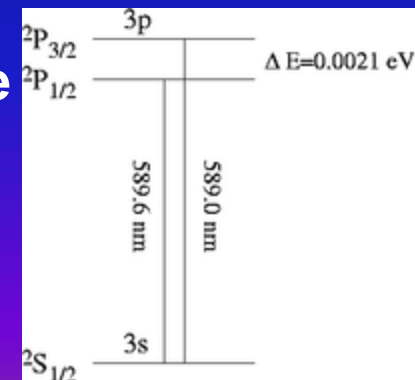
Die Fraunhoferlinien erlauben Rückschlüsse auf die chemische Zusammensetzung und Temperatur der Gasatmosphäre der Sonne und von Sternen.

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



Gelbe Flamme durch Salz (NaCl) in Flamme



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 :

$$\vec{B}_l = \frac{Ze\mu_0 \vec{l}}{8\pi r^3 m_0} = O(1T) \text{ f\u00fcr } Z = 1 \text{ und } r = 1 \text{ \AA} \equiv 10^{-10} m \text{ (2)}$$

(2) in (1) :

$$V_{l,s} = \frac{a}{\hbar^2} |l| |s| \cos(\vec{l}, \vec{s}) \approx 10^{-4} eV \text{ f\u00fcr } Z = 1 \text{ und } r = 1 \text{ \AA} \text{ (3)}$$

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

Wie gro\u00df 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

$$\begin{cases} a^2 = l(l+1)\hbar^2 \\ b^2 = s(s+1)\hbar^2 \\ c^2 = j(j+1)\hbar^2 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \frac{|l||s|}{\hbar^2} \cos \alpha = \frac{a^2 - b^2 - c^2}{2} \rightarrow \quad :$$

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

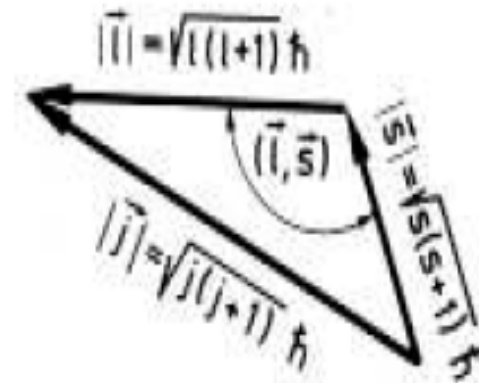
Bisher hat man so gerechnet, als ob sich das Elektron auf festen Bahnen bewegt. In der Quantenmechanik geht man davon aus, dass es keine festen Bahnen gibt, daher ersetzt man $\frac{1}{r^3}$ durch den Mittelwert

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

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

$$\begin{aligned} \vec{L} &= \sum \vec{l}_i \\ \text{Bei mehreren Elektronen : } \vec{S} &= \sum \vec{s}_i \\ \vec{J} &= \vec{L} + \vec{S} \end{aligned}$$

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



Zusammenfassung Spin-Bahn-Kopplung

Gesamtdrehimpuls des Elektrons setzt sich aus Spin- und Bahnanteil vektoriell zusammen:

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

Es gelten die quantenmechanischen Eigenschaften:

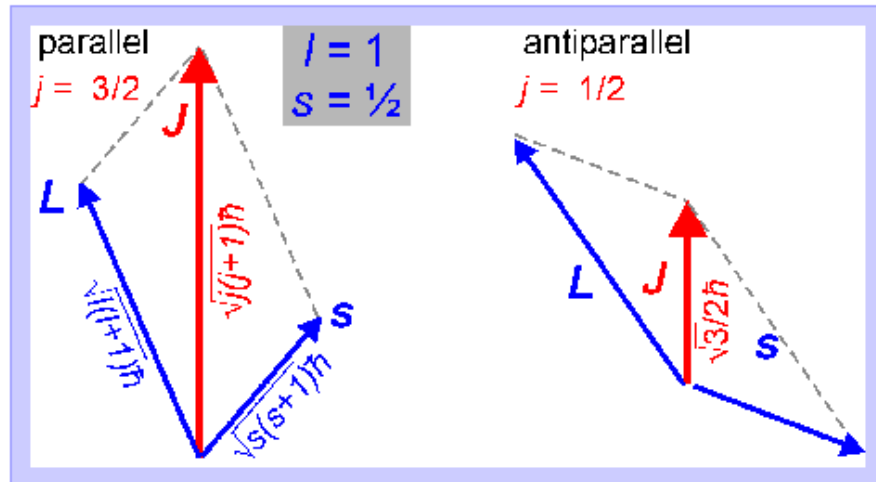
$$J^2 = j(j+1)\hbar^2$$

$$J_z = m_j \hbar$$

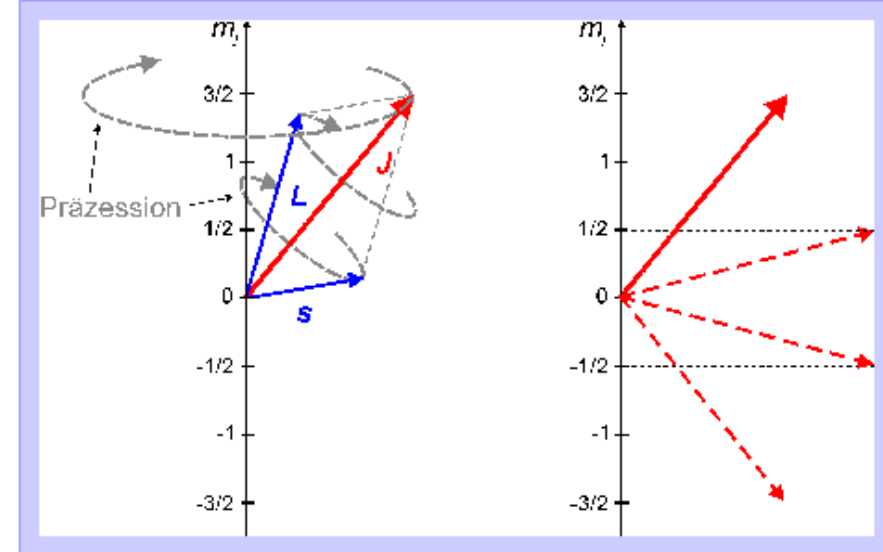
$$-j \leq m_j \leq j$$

Beim H-Atom kann die Gesamtspinquantenzahl je nach Kopplung zwei Werte annehmen:

- ▶ parallel: $j=l+1/2$
- ▶ antiparallel: $j=l-1/2$



Die Zustände sind $2j+1$ -fach entartet.



Gleichzeitig scharf gemessen können werden:

- ▶ Bahndrehimpuls $L^2 = l(l+1)\hbar^2$
- ▶ Gesamtdrehimpuls $J^2 = j(j+1)\hbar^2$
- ▶ Projektion des Gesamtdrehimpulses $J_z = m_j \hbar$

Nicht scharf messbar sind die

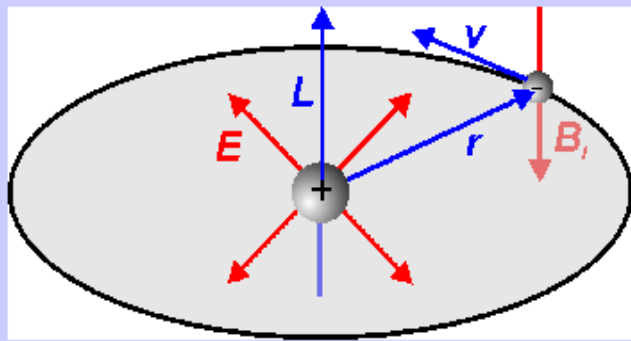
- ▶ Projektion des Bahndrehimpulses m_l
- ▶ Projektion des Spins m_s

Für Übergänge muss gelten: $\Delta l = \pm 1$, $\Delta j = 0, \pm 1$, $\Delta m_j = 0, \pm 1$. $\Delta j = 0$ (Spin-flip) ist unwahrscheinlicher.

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

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

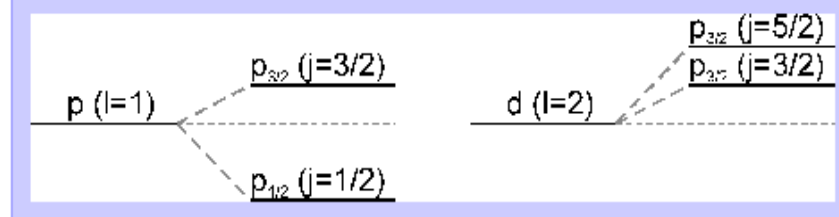
Mit $J^2 = L^2 + S^2 + LS$ und

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

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_j und m_s sind unbestimmt.

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

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

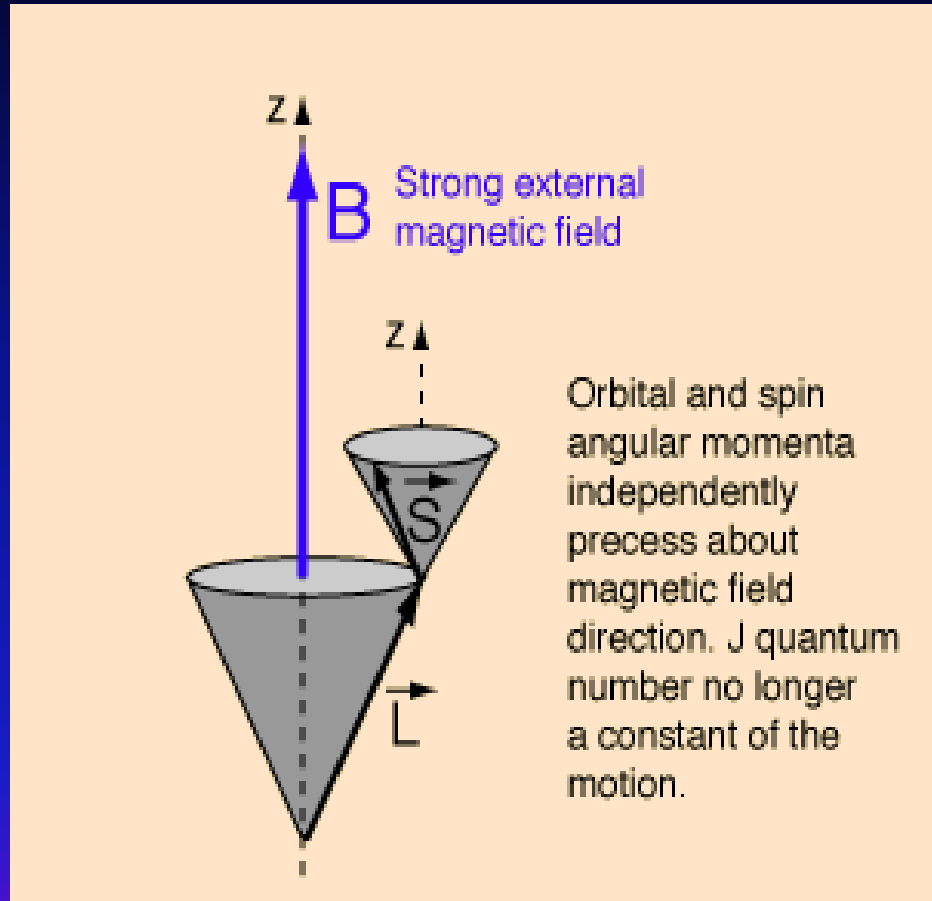
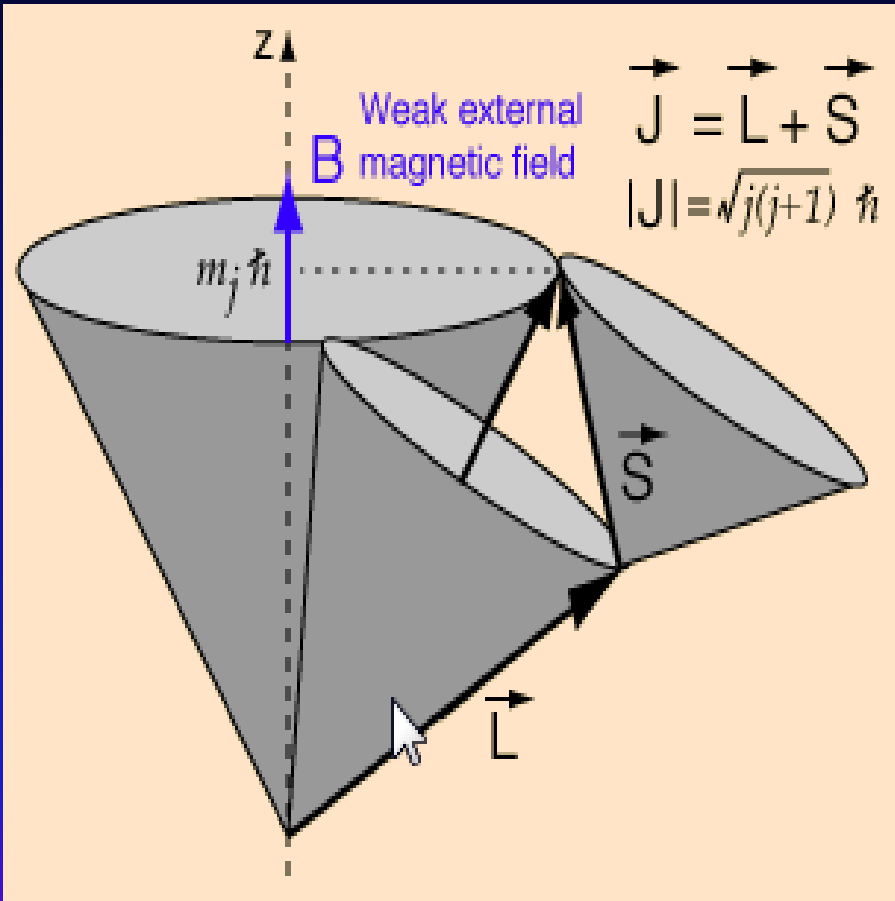
Paschen-Back-Effekt (Wiki)

Der Paschen-Back-Effekt beschreibt die Entkopplung von Spin- und Bahndrehimpulsen beim Anlegen eines starken magnetischen Feldes. Ein Spektrum mit anomalem Zeeman-Effekt (für Atome, die einen Gesamtspin S aufweisen) geht somit in die Form eines Spektrums mit normalem Zeeman-Effekt über.

Bei starken Magnetfeldern ($B > 1$ T) ist die Kopplung der magnetischen Momente an das angelegte Feld stärker als die Spin-Bahn-Kopplung, so dass der Gesamtspin S und der Gesamtbahndrehimpuls L nicht mehr zu J koppeln, sondern unabhängig voneinander um die Achse des angelegten Magnetfeldes präzedieren.

1921 beobachteten Friedrich Paschen und Ernst Back (1881–1959), dass der anomale Zeeman-Effekt (für Systeme mit einem Gesamtspin $S > 0$) in den normalen Zeeman-Effekt (für Atome mit Gesamtspin $S = 0$) übergeht. Dies kann als Entkopplung von L und S verstanden werden, da der Einfluss des Gesamtspins bei fehlender Spin-Bahn-Kopplung verschwindet.

Paschen-Back-Effekt



Weak $B = B_{\text{ext}} < B_{\text{int}}$

Strong $B = B_{\text{ext}} > B_{\text{int}}$

Paschen-Back-Effekt

$$|\vec{B}_0| > |\vec{B}_J| \Rightarrow \vec{L} - \vec{S} \text{ -Kopplung wird aufgehoben}$$

Na: ein 3s Elektron, Li: ein 2s Elektron: Bint klein

$$\text{Na, } ^2P_{1/2} \text{ bzw. } ^2P_{3/2} \rightarrow ^2S_{1/2} \quad \vec{L} - \vec{S} \text{ -Kopplung} \Rightarrow 17.2 \text{ cm}^{-1}$$

$$\text{Li, entsprechend} \quad \Rightarrow 0.3 \text{ cm}^{-1}$$

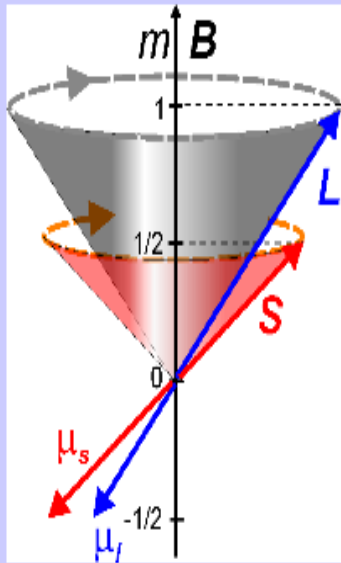
$$|\vec{B}_0| = 3 \text{ T} \Rightarrow \text{Zeemann-Aufspaltung} \approx 1 \text{ cm}^{-1}$$

$\Rightarrow 3 \text{ T}$ sind für Li ein großes und für Na ein kleines Feld

Feinstruktur in starken Magnetfeldern

Bei sehr starken Magnetfeldern wird die LS-Kopplung überwunden.

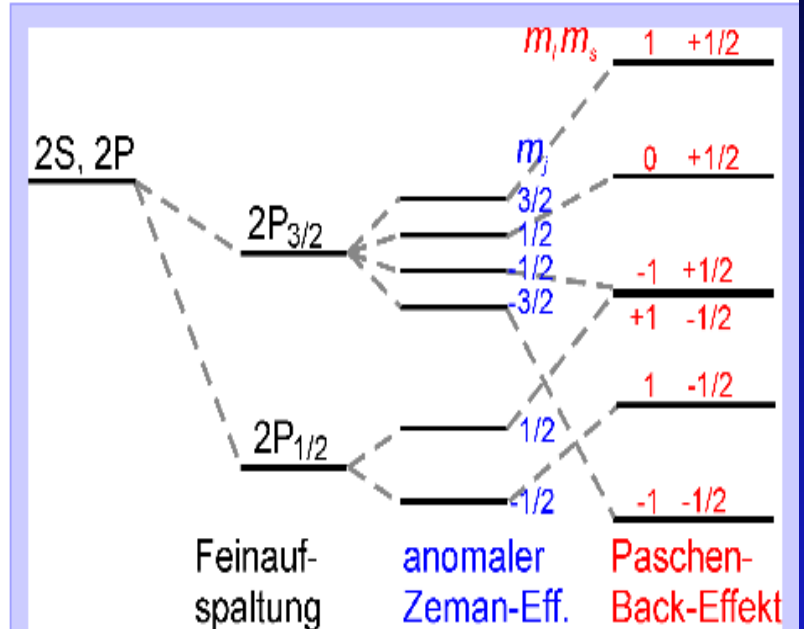
L und S koppeln dann unabhängig voneinander an das externe Magnetfeld.



Dies führt zu der **Energieaufspaltung**

$$\Delta E = (m_l + g_s m_s) \mu_B B$$

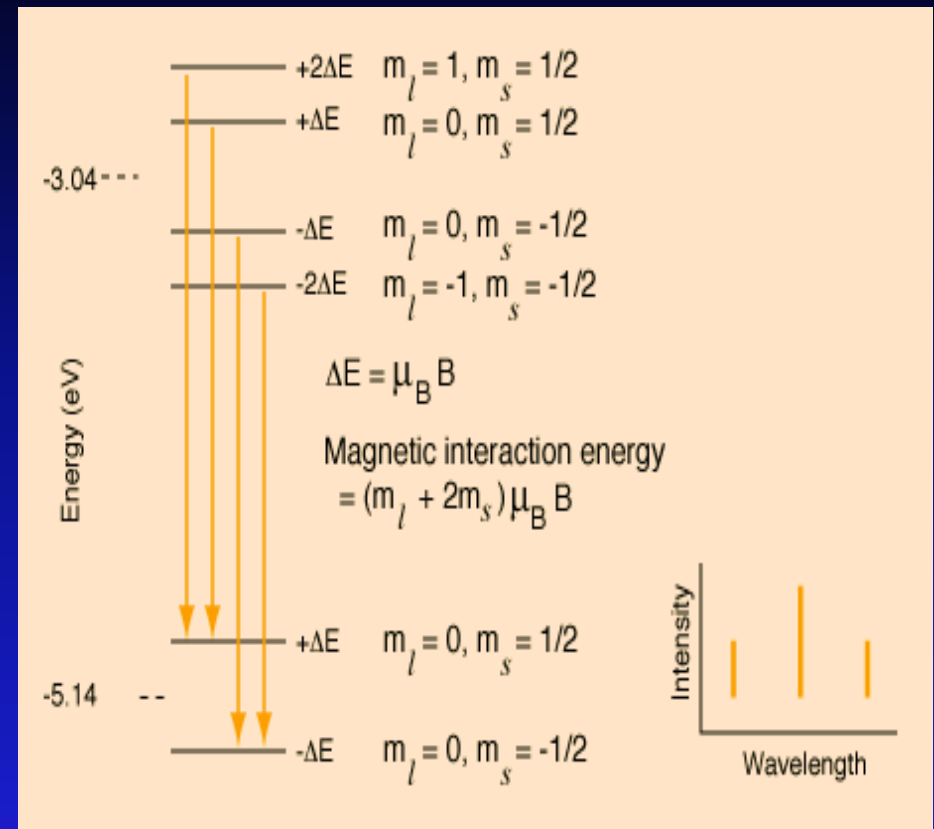
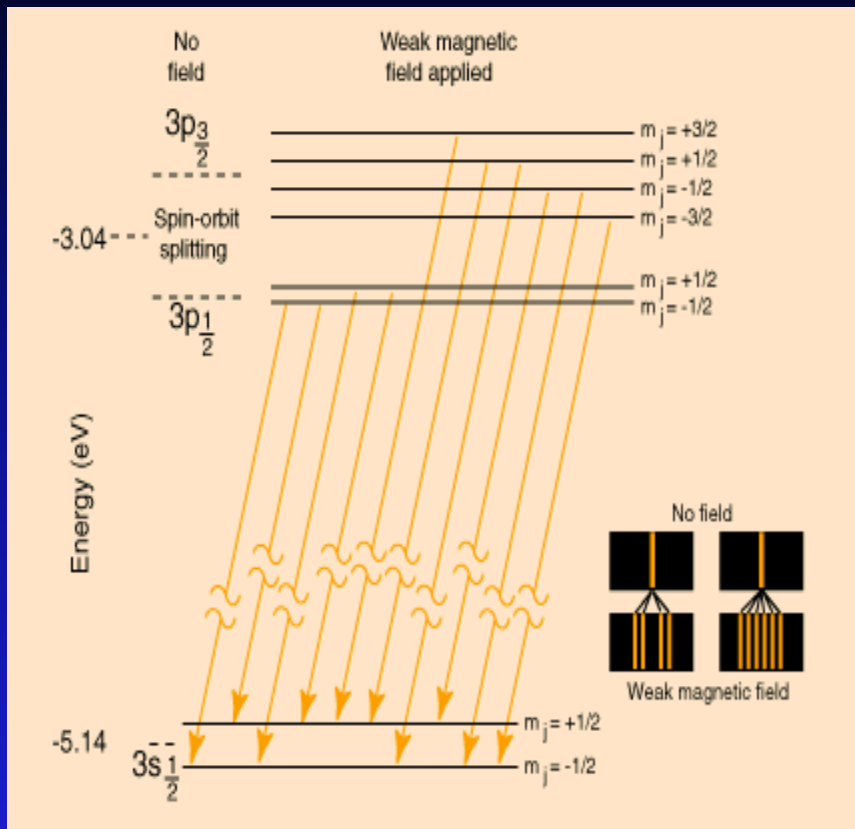
Termschema



Aufspaltung durch LS-Kopplung, anomalem Zeeman-Effekt und bei starker Kopplung von L und S .



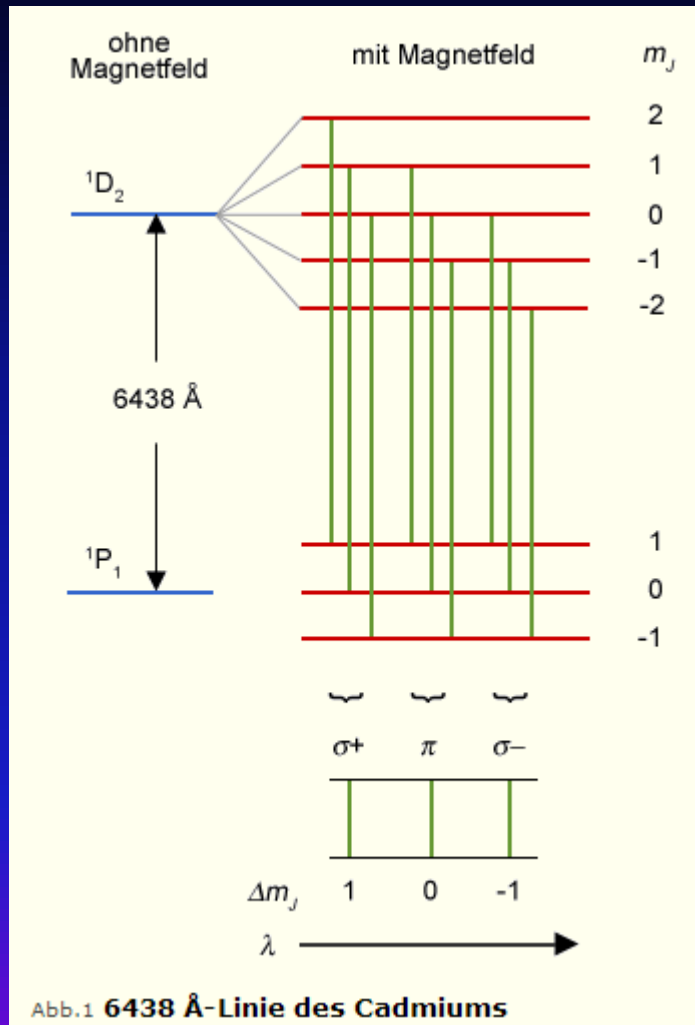
Bei Paschen-Back: Spektrum = Triplet, wie bei normalem Zeeman-Effekt



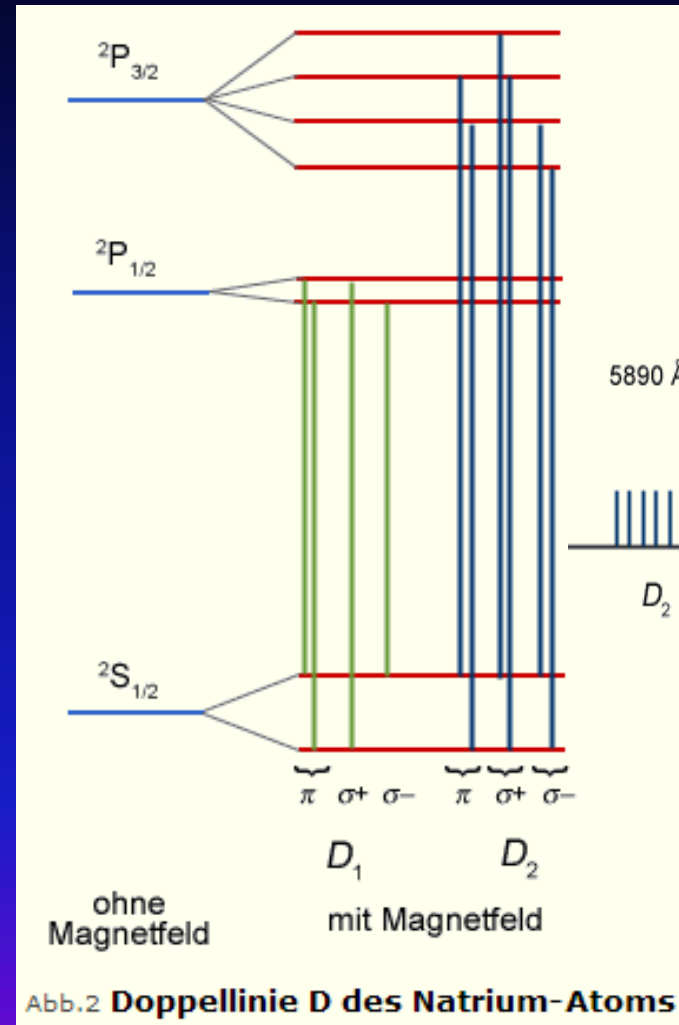
Auswahlregeln für optische Übergänge: $\Delta m_L = 0, \pm 1$
 $\Delta m_S = 0$

⇒ Spektrum wird einfacher

Spektrum bei normalem und anomalem Zeeman-Effekt



Normaler Zeff. mit $S=0$



Anomaler Zeff. mit $S=1/2$

Notation
der Niveaus:
 $2S+1L_J$

Zusammenfassung der Feinstruktur durch Spin-Bahnkopplung

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 $V_{L,S}$ sehr klein beim Wasserstoff $\Delta E \approx 0,33^{-1} \text{cm} \approx$
(mit $E = \vec{\nu}hc, \vec{\nu} = \frac{\nu}{c} = \frac{1}{\lambda} = \text{Wellenzahl}$) $\approx 4,10^{-5} \text{eV}$ 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

Quantenzahlen bei der Spin-Bahn-Kopplung

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

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.

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

Zusammenfassung der Feinstruktur durch Spin-Bahnkopplung

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

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

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.

Bemerkenswert:

$$\begin{aligned} E_{rel} &= \text{abh. von } l \\ E_{l,s} &= \text{abh. von } j, l, s \\ E_{FS}^{Dirac} &= \text{abh. von } j \end{aligned}$$

Vollständiges Termschema des H-Atoms

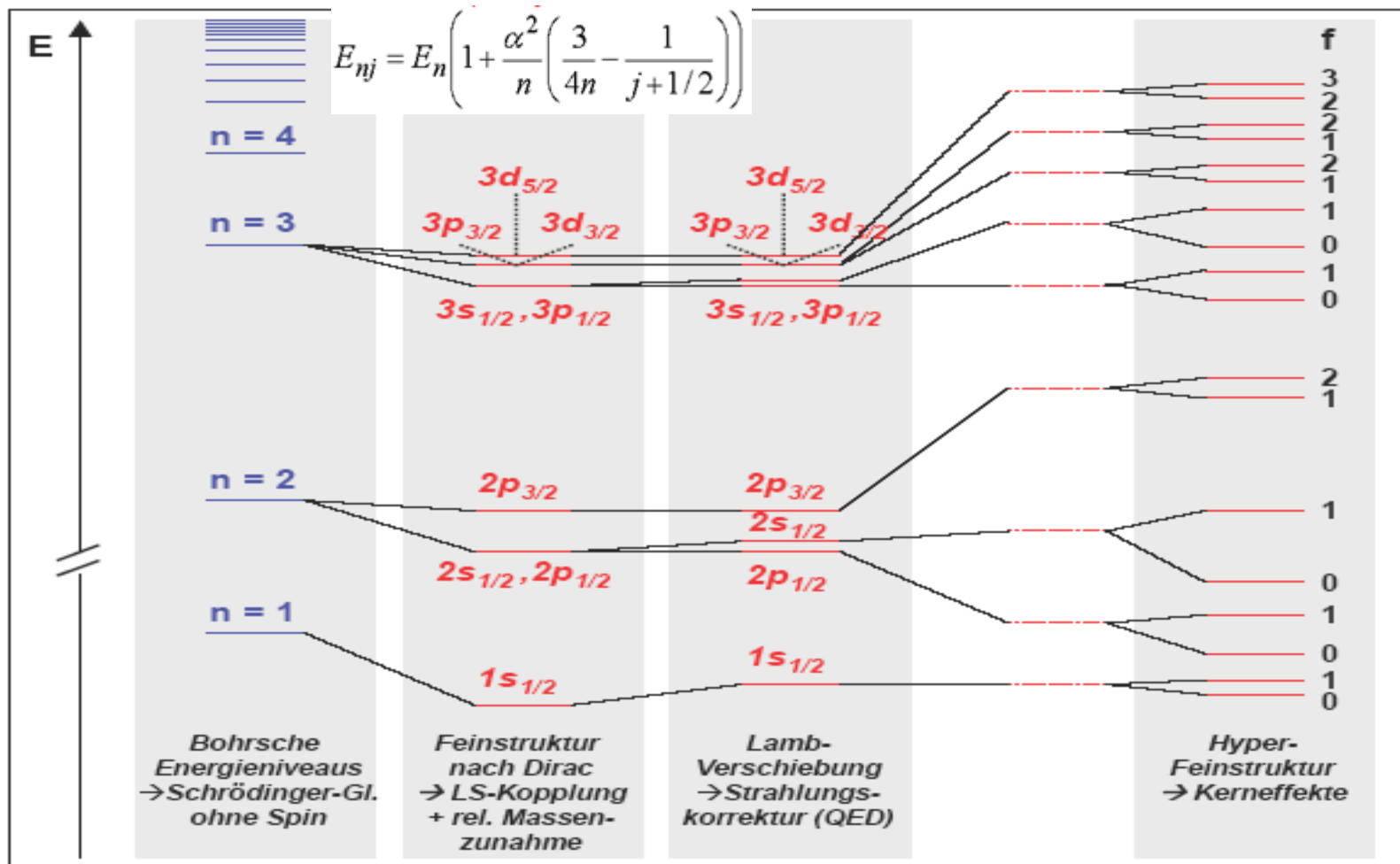


Abbildung 4.19: Vollständiges Termschema des Wasserstoffatoms mit allen bisher bekannten Wechselwirkungen. Die Fein- und Hyperfeinstruktur, sowie die Lamb-Shift sind aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht maßstabsgerecht gezeichnet.

LS-Kopplung bei mehreren Elektronen

Die Spin-Bahn-Kopplung einzelner Elektronen wird aufgebrochen bei mehreren Elektronen, wenn die Spin-Bahn-Wechselwirkung klein ist. vor allem bei kleinen Kernladungszahlen bis etwa Kohlenstoff, weil $V_{LS} \propto Z^4$

Stattdessen koppeln die Bahndrehimpulse und Spindrehimpulse der einzelnen Elektronen zu Gesamtdrehimpulse :

$$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i \text{ und } \vec{S} = \sum_i \vec{s}_i$$

L und S koppeln zum Gesamtdrehimpuls : $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

Gelegentlich wird die LS-Kopplung nach den Physikern Henry Norris Russell und Frederick Albert Saunders mit Russell-Saunders-Kopplung bezeichnet.

jj-Kopplung bei vielen Elektronen

Bei schweren Kernen ist die Spin-Bahn Wechselwirkung groß, weil $V_{LS} \propto Z^4$

Für jedes einzelne Elektron gilt dann: $\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i$

Die koppeln zum Gesamtdrehimpuls : $\vec{J} = \sum_i \vec{j}_i$

Diese jj-Kopplung dominiert bei schweren Atomen mit großen Ladungszahlen Z (z. B. bei Blei) . Bei leichten Atomen hat man die LS-Kopplung. Bei den dazwischen liegenden Atomen liegen Mischformen vor.

Zum Mitnehmen

Spin-Bahn Kopplung: der Spin richtet sich im Magnetfeld der Bahnbewegung. Die zwei Ausrichtungen des Spins \Rightarrow Dubletts in den Spektren, z.B. bei Na D-Linien.

Paschen-Back: externe Magnetfeld überwiegt und Spins richten sich im externen statt internen Magnetfeld. Anomaler Zeeman-Effekt wird normaler Zeeman-Effekt.

Mehrere Elektronen, leichte Atome ($Z < 6$):

Spin-Bahn-Kopplungsenergie $\propto Z^4$. Daher wird die Spin-Bahnkopplung der einzelnen Elektronen bei leichten Atomen aufgebrochen und es gilt:

$$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i \text{ und } \vec{S} = \sum_i \vec{s}_i \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Mehrere Elektronen, schwere Atome: Spin-Bah-Kopplungen der einzelnen Elektronen stark und es gibt jj-Kopplungen:

$$\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i \quad \vec{J} = \sum_i \vec{j}_i$$