3 Wellenmechanik mehrerer ununterscheidbarer Teilchen

3.1 Spin und magn. Moment des Elektrons

Neben Masse und Ladung haben Elektronen eine weitere Eigenschaft: der Spin S
also ein Eigendrehimpuls

Es gilt:

$$S = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar \qquad s \in \{-\tfrac{1}{2}, +\tfrac{1}{2}\}$$

vgl. $L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar$; $\ell \in \{0, 1, 2 \ldots\}$

und $S_z = m_s \cdot \hbar \qquad m_s \in \{-s, s\} = \{-\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\}$

$L_z = m_L \cdot \hbar$ (siehe Kap. 2.4.1)

UNTERSCHIED: $s = \frac{1}{2}$ (für Elektron)

Es folgt das magn. Moment μ_B

$$\mu_S = -\, m_s\, g_s\, \mu_B \qquad (\mu_B \text{ Bohrsche Magneton})$$

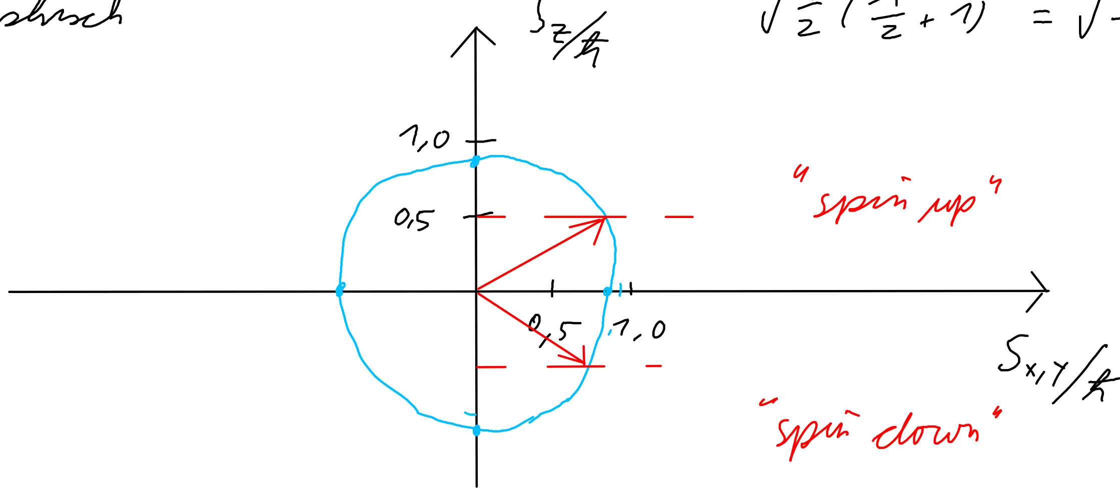
vgl. $\mu = -\, m_L\, g_e \mu_B$ (Kap 2.4.3)

ABER $g_s = 2{,}0023 \approx 2$

($g_e = 1{,}00000 = 1$) (exakt)

graphisch

$\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)} = \sqrt{\frac{3}{4}} \approx 0{,}866$



Eine systematische theoretische Beschreibung des Elektronenspins ist im Rahmen der rel. Quantenmechanik möglich (Dirac - Gleichung)

Diese Diskussion liefert $g = 2$.

Die Abweichung lässt sich mit der Quantenelektrodynamik erklären. $\Rightarrow$ $g_s = 2{,}0023$

Aus der relat. QM ergeben sich die Spinoperatoren

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

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

(Eigenwert)

$$\hat{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} = \hbar^2 \frac{3}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Die Eigenvektoren von $\hat{S}_z$ sind offensichtlich

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

mit Eigenwerten

$$\pm \frac{\hbar}{2}$$

Mit Spin wird die elektronische Wellenfkt. zu einem 2er Vektor

$$\psi(\vec{r},t) \longrightarrow \psi_\uparrow(\vec{r},t)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_\downarrow(\vec{r},t)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Durch das magn. Moment des Elektrons resultiert wieder eine Energie im stat. hom. Magnetfeld

$\vec{B} = (0, 0, B)$

$$\Rightarrow \quad \boxed{E = \pm \underbrace{\frac{1}{2}}_{+m_s} \; g_s \, \mu_B \cdot B}$$ Zeeman – Energie des Elektrons

analog Bahndrehimpuls - Energie

$$E = + m_L \, g_s \, \mu_B \, B$$ (siehe Kap. 2.4.3)

3.1.1 Spin - Bahn - Kopplung

Die Bahnbewegung führt $(\ell \neq 0)$ zu einem magn. Moment, also einem lokalen Magnetfeld im Atom. Dieses Magnetfeld kann an den Spin über die Zeeman-Energie des Elektrons ankoppeln.

Es gilt:

$$\boxed{\hat{H} \longrightarrow \hat{H} + \underbrace{\frac{e}{m} \hat{\vec{S}} \cdot B}_{\sim} + \underbrace{\frac{\mu_0 Z e^2}{8 \pi m^2} \frac{1}{\hat{r}^3} (\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}})}_{\sim}}$$

m: Ruhemasse des Elektrons

Z: Kernladungszahl (= 1 im H-Atom)

$\sim$ Zeeman - Energie (Kap 3.1 $E = \pm \frac{1}{2} g_s \mu_B B$)

$\sim$ kann aus Bohrschen Atommodell gewonnen werden oder aus Elektro - QM

$\hat{\vec{S}}$ = Spin - Operator $\quad \hat{\vec{S}} = \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix}$

Abgesehen davon resultiert ein (Kap 3.1.2)

Gesamtdrehimpuls = Bahndrehimpuls + Spin

hier

und ein Gesamtmagn. Moment = Bahnmag. Moment + Spin mag Mom.

Beachte: Hier müssen Vektoren addiert werden.

Für den Gesamtdrehimpuls J gilt:

$$J = \sqrt{j(j+1)}\,\hbar$$

mit $j = |l \pm s|$ $\quad (s = \frac{1}{2})$

vgl. $L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$ (siehe Kap 2.4.1)

$l = 0, 1, \ldots, (n-1)$

halbe Zahl

$$J_z = m_j \cdot \hbar \qquad m_j = -j, \ldots, \ldots, +j$$

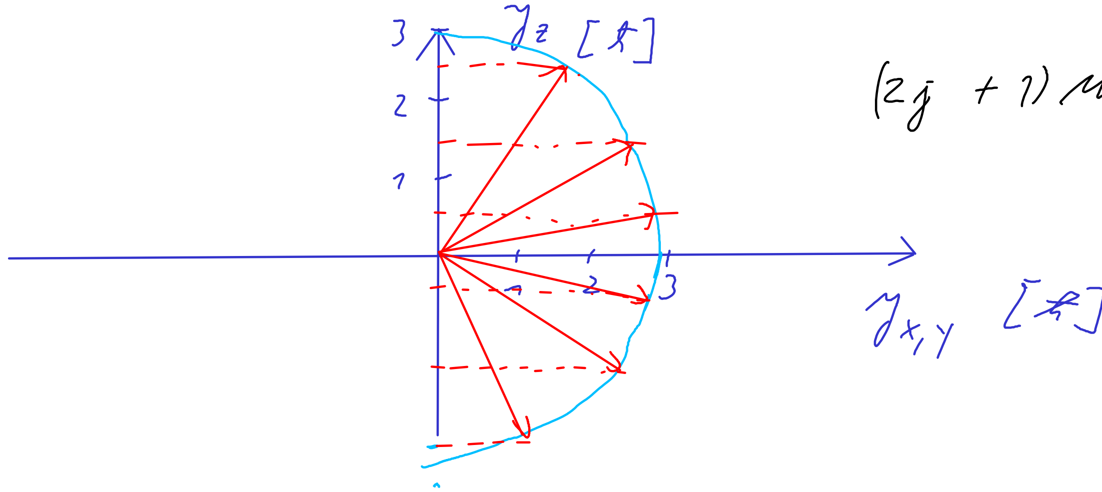
$(2j+1)$ mögl.

analog $L_z = m_l \hbar \qquad m_l = -l, \ldots, +l$

$(2l+1)$ mögl.

Beispiel $\quad j = \frac{5}{2} \left(= |\underset{\overset{\shortparallel}{3}}{l} - \frac{1}{2}|\right)$

$$\Rightarrow J = \sqrt{\frac{5}{2}\left(\frac{5}{2}+1\right)}\,\hbar = \sqrt{\frac{35}{4}}\,\hbar \approx 2{,}96\,\hbar$$



$(2j + 1)$ Möglichkeiten

3.1.1 Feinstrukturkonstante

Bsp (H-Atom)

Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung
und relativistischen Masseänderungseffekte
(gleiche Größenordnung)

führt zu den Eigenenergien (Dirac)

$\vec{B} = 0$, n: Hauptquantenzahl, j Gesamtdrehimpulsqz.

$$E_{n,j} = -\frac{Ry}{n^2}\left(1 + \underbrace{\frac{\alpha^2}{n}\left[\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right]}_{\text{kleine (feine) Korrektur}}\right)$$

siehe Kap 2.4.2

α = Feinstrukturkonstante

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c_0} \approx \frac{1}{137}$$

$$\hat{=} \frac{\text{Geschwindigkeit des El. auf 1. Bohrschen Bahn}}{\text{Vakuumlichtgeschwindigkeit}} = \frac{v_1}{c_0}$$

$$\left(v_1 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar}\right)$$