H-Atom; LS-Kopplung

Betrachte ein Elektron um ein Proton kreisend. Das Elektron bewegt sich mit der Geschwindigkeit $\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m_e}$ in dem vom Proton erzeugten elektrostatischen Feld $\vec{E}$. Aus der speziellen Relativitätstheorie folgt dann das Auftreten eines magnetischen Feldes $\vec{B}$ im Ruhesystem des Elektrons, das zur ersten Ordnung in $\frac{v}{c}$ gegeben ist durch (Herleitung siehe Eckhard Rebhan Theoretische Physik I Abschn:12.3.2 S.450):

$$\begin{aligned} \vec{B} &= -\frac{1}{c^2}\vec{v}\times\vec{E} \qquad \text{mit } \vec{p} = m_e\vec{v} \\ &= -\frac{1}{c^2 m_e}\vec{p}\times\vec{E} \\ &= \frac{1}{c^2 m_e}\vec{E}\times\vec{p} \end{aligned} \tag{1}$$

Wobei das Minuszeichen dadurch bewirkt wird, dass im Ruhesystem des Elektrons das E-Feld eine Geschwindigkeit $-\vec{v} = -\frac{\vec{p}}{m_e}$ relativ zum Elektron hat. Das Elektrische Feld lässt sich wie folgt darstellen:

$$\begin{aligned} \vec{E} &= -\vec{\nabla}\phi(\vec{r}) \qquad \text{mit } V(r) = -e\phi(r) \\ &= \frac{1}{e}\nabla V(r) \qquad \text{setze } \vec{\nabla} \text{ in Kugelkoordinaten ein} \\ &= \frac{1}{e}\frac{\vec{r}}{r}\frac{dV(r)}{dr} \end{aligned} \tag{2}$$

Einsetzen der Gleichung (2) in (1):

$$\begin{aligned} \vec{B} &= \frac{1}{c^2 m_e}\frac{1}{e}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\underbrace{\vec{r}\times\vec{p}}_{\equiv\vec{L}} \\ &= \frac{1}{c^2 m_e e}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\vec{L} \end{aligned} \tag{3}$$

Mit dem magnetische Moment für das Elektron:

$$\vec{\mu} = \frac{e\vec{S}}{m_e} \tag{4}$$

Folgt für die Wechselwirkungsterm im Hamiltonoperator:

$$H_{LS} = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = \frac{e}{m_e}\vec{S}\cdot\vec{B} = \frac{1}{c^2 m_e^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\vec{S}\cdot\vec{L} \tag{5}$$

Dieser Term wird erst mit der Thomas Präzession $\frac{1}{2}$ richtig der sich aus der Dirac Gleichung genau herleiten lässt. D.h. der korrekte Term lautet:

$$\boxed{H_{LS} = \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{c^2 m_e^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\vec{S}\cdot\vec{L}} \tag{6}$$

Das Potential $V(r)$ vom Wasserstoffatom ist gegeben mit $V(r) = -\frac{e^2}{r}$ damit ergibt sich der H_{LS}-Term:

$$H_{LS} = \frac{e^2}{2\cdot c^2 m_e^2}\frac{1}{r^3}\vec{S}\cdot\vec{L} \tag{7}$$

Der Hamilton Operator für das Wassersoffatom lautet nun:

$$
\begin{aligned}
H &= \frac{p^2}{2m_e} + V(r) + H_{LS} \\
&= \underbrace{\frac{p^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r}}_{H_0} + \underbrace{\frac{e^2}{2 \cdot c^2 m_e^2} \frac{1}{r^3} \vec{S} \cdot \vec{L}}_{\text{Störungsterm}}
\end{aligned} \tag{8}
$$

Die Lösungen des H_0-Terms sind bereits aus dem allgemeinen Wasserstoffproblem bekannt:

$$
\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \tag{9}
$$

Den H_{LS}-Term können wir als ein Störungsterm behandeln. Wähle anstelle der $\vec{L}^2, \vec{L}_z, \vec{S}^2, \vec{S}_z$-Basis eine zu den Eigenzuständen $|nljm\rangle$ passende $\vec{J}^2, \vec{J}_z, \vec{L}^2, \vec{S}^2$-Basis.

$$
\begin{aligned}
\vec{J} &= \vec{L} + \vec{S} \\
\vec{J}^2 &= (\vec{L} + \vec{S})^2 = \vec{L}^2 + 2\vec{L}\vec{S} + \vec{S}^2 \\
\Leftrightarrow \vec{L}\vec{S} &= \frac{1}{2}(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)
\end{aligned} \tag{10}
$$

Daraus folgt der H_{LS}-Term

$$
H_{LS} = \frac{e^2}{4c^2 m_e^2} \frac{1}{r^3} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) \tag{11}
$$

Für die Energie-Eigenwerte in Störungsrechung bis 1-Ordnung ergibt sich:

$$
E_{nlj} = E_n^{(0)} + \langle nljm | H_{LS} | nljm \rangle = -\frac{e^2}{2a_0} \frac{1}{n^2} + E_{LS}^{(1)} \tag{12}
$$

Referenzen

- Claude Cohen-Tannoudji Quantenmechanik Band 2
- Zettili Quanten Mehanics
- Rollnik Quantentheorie 2