Skript zur 21. Vorlesung "Quantenmechanik", Freitag den 1. Juli, 2011.

14.3 Anwendung auf die Spin-Bahn-Kopplung

Wir wenden nun diese allgemeine Ergebnisse auf den Fall $\mathbf{j}_1 = \mathbf{l}$ und $\mathbf{j}_2 = \mathbf{s}$ an. Wir finden so, dass die möglichen Eigenwerte $\hbar^2 j(j+1)$ des Gesamtdrehimpulsoperators $\hat{j}^2$ durch

$$j \;=\; \begin{cases} l \pm \frac{1}{2} & (\text{wenn } l \geq 1) \\ \frac{1}{2} & (\text{wenn } l = 0) \end{cases}$$

gegeben werden. Die zugehörige Eigenzustände werden mit $|jml\rangle$ mit $m = -j, \ldots, j$ angedeutet. Der Spin-Bahn Hamilton Operator $\hat{H}_{\rm SO}$ ist diagonal in dieser Basis, und mithilfe der Gleichung

$$\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2}\left(\hat{j}^2 - \hat{l}^2 - \hat{s}^2\right)$$

finden wir, dass

$$\begin{aligned} \langle njml|\hat{H}_{\rm SO}|njml\rangle &= \frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right] \\ &\quad \times \frac{1}{2m^2c^2}\int dr\, r^2\, |R_{nl}(r)|^2\, \frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(-\frac{e^2}{r}\right) \\ &= \frac{mc^2(Z\alpha)^4}{4n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \times \begin{cases} l & (j = l + \frac{1}{2}), \\ -l-1 & (j = l - \frac{1}{2}) \end{cases} \end{aligned}$$

für $l > 0$ und

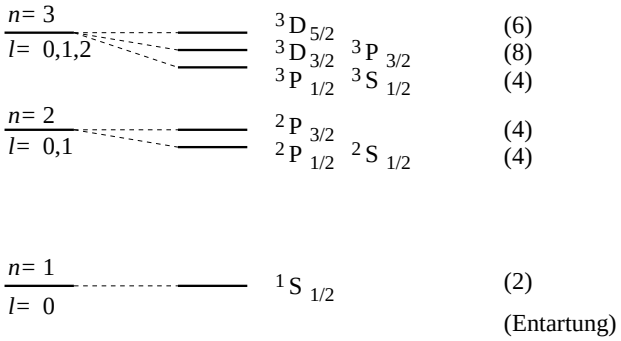
$$\langle njml|\hat{H}_{\rm SO}|njml\rangle \;=\; 0$$

für $l = 0$.

Alle drei Korrekturen zusammen ergibt dann:

$$\Delta E_{n,j=l\pm\frac{1}{2},l} = \frac{e^2Z^2}{2a_0n^2}\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j+\frac{1}{2}}\right)$$

Dieser Energie-Eigenwert wird mit ${}^n l_j$ bezeichnet, wobei für den Nebenquantenzahl l die spektroskopische Notation $l =$ S,P,D,F,... verwendet wird.


n= 3
l= 0,1,2
3D5/2
3D3/2
3P1/2
3P3/2
3S1/2
(6)
(8)
(4)
n= 2
l= 0,1
2P3/2
2P1/2
2S1/2
(4)
(4)
n= 1
l= 0
1S1/2
(2)
(Entartung)