

# EP III - Seminar

## Drehimpulskopplung

Bei Atomen mit mehreren Elektronen müssen alle magnetischen Wechselwirkungen berücksichtigt werden, die auf Grund der magnetischen Momente von Elektronen und Atomkernen auftreten können. Diese Wechselwirkungen bewirken eine Aufspaltung der Energierterme in verschiedene Feinstrukturkomponenten. Bei Mehrelektronenatomen können mehr als zwei Feinstrukturkomponenten auftreten, das nennt man ein Multiplett.

Es gibt unterschiedliche Varianten, wie die einzelnen Drehimpulse zu einem Gesamtdrehimpuls koppeln. Dies hängt im wesentlichen davon ab, wie stark die Kopplung zwischen  $\vec{l}$  und  $\vec{s}$  eines einzelnen Elektron (gemäß Feinstrukturaufspaltung) im Vergleich zur Kopplung der einzelnen Bahndrehimpulse  $\vec{l}_i$  untereinander ist.

Die Kopplung ist immer Folge der Erniedrigung der Energie im System, wenn sich das magnetische Moment eines Teilchens  $\vec{\mu}_1$  in einem internen Magnetfeld  $B_2$ , das durch ein anderes Teilchen erzeugt wird, ausrichtet. Die Stärke der inneren Magnetfelder  $B_2$  entscheidet, welche Drehimpulse wie miteinander koppeln. Die Multiplettaufspaltung sinkt mit zunehmenden Werten von  $n$ .

**Kopplung der Feinstrukturaufspaltung** Die Kreisbewegung des Elektrons entspricht einem Drehimpuls  $\vec{l}$ . Vom Ruhesystem des Elektrons aus betrachtet, erzeugt der Kreisstrom des Atomkerns mit positiver Ladung ein Magnetfeld, das in die selbe Richtung wie  $\vec{l}$  zeigt. Das magnetische Moment des Elektrons  $\vec{\mu}_s$  zeigt entgegen dem Spin  $\vec{s}$ , da es ein negativ geladenes Teilchen ist. Eine Erniedrigung der Energie erhält man nur bei einer parallelen Ausrichtung des Magnetfeldes und des magnetischen Moments. Dies bedeutet für die Feinstrukturaufspaltung einen günstigeren Energiezustand für die anti-parallele Orientierung von  $\vec{s}_z$  und  $\vec{s}_z$ .

**Kopplung der Hyperfeinstrukturaufspaltung** Die Kreisbewegung des Elektrons erzeugt ein Magnetfeld  $\vec{B}_j$  am Kernort, das wieder in entgegengesetzte Richtung zum Gesamtdrehimpuls  $\vec{j}$  zeigt. Das magnetische Moment des Protons  $\vec{\mu}_i$  zeigt in dieselbe Richtung wieder Kernspin  $\vec{I}$ , da das Proton ein positives Teilchen ist. D.h. man bekommt bei der Hyperfeinstrukturaufspaltung wieder eine Erniedrigung der Energie, wenn  $\vec{\mu}_{I,z}$  und  $\vec{B}_j$  parallel sind und damit  $\vec{j}_z$  und  $\vec{I}_z$  anti-parallel.

**Kopplung von zwei Bahndrehimpulsen** Bei der Kopplung der Drehimpulse von zwei Elektronen  $\vec{l}_1$  und  $\vec{l}_2$  zeigen sowohl das erzeugte Magnetfeld  $\vec{B}_{l,1}$  und  $\vec{B}_{l,2}$  als auch das magnetische Moment  $\vec{\mu}_{l,1}$  und  $\vec{\mu}_{l,2}$  jeweils in die entgegengesetzte Richtung von  $\vec{l}_1$  und  $\vec{l}_2$ . D.h. eine parallele Ausrichtung des magnetischen Moments  $\vec{\mu}_{1,z}$  von Elektron 1 im internen Magnetfeld  $\vec{B}_{l,2}$  das durch Elektron 2 am Ort von Elektron 1 erzeugt wird, führt zu einer Erniedrigung des Energieeigenwertes des Gesamtsystems.

**LS-Kopplung** Bei der LS-Kopplung ist die elektrostatische Wechselwirkung aller Elektronen groß im Vergleich zur Spin-Bahn-Wechselwirkung einzelner Elektronen. Die Spin-Bahn-Kopplung jedes Elektrons wird aufgebrochen. Stattdessen koppeln die einzelnen Bahndrehimpulse  $\vec{l}_i$  und Spindrehimpulse  $\vec{s}_i$ :

$$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i$$

$$\vec{L}_z = \sum_i \vec{l}_{z,i}$$

$$\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i$$

$$\vec{S}_z = \sum_i \vec{s}_{z,i}$$

Hierbei gilt zu beachten, dass in der Quantenmechanik nur die z-Komponente und die Länge des Drehimpulses charakterisiert ist. Damit die Länge des Vektors  $|\vec{L}|$  mit ganzzahligem  $L$  beschrieben werden kann, ist die Orientierung der einzelnen Bahndrehimpulse  $\vec{l}_i$  in der xy-Ebene nicht mehr beliebig. Nach der Festlegung des Gesamt-Bahndrehimpulses  $\vec{L}$  und des Gesamtspins  $\vec{S}$ , koppeln  $\vec{L}$  und  $\vec{S}$  untereinander zu einem Gesamtdrehimpuls  $\vec{J}$ . Dies bezeichnet man als LS-Kopplung.

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

Die Stärke dieser Kopplung ist proportional zu dem Skalarprodukt  $\vec{L}\vec{S}$ , das durch die Quantenzahlen  $L, S, J$  ausgedrückt werden kann zu:

$$CLS = \frac{1}{2}C[J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]\hbar$$

Der Gesamtdrehimpuls kann Werte zwischen  $J = L + S$  und  $J = L - S$  annehmen. Diese Form der Spin-Bahn-Kopplung dominiert bei Atomen mit kleinen Kernladungszahlen bis etwa Kohlenstoff.

**jj-Kopplung** Die jj-Kopplung ist die Form der Spin-Bahn-Kopplung, die bei schweren Atomen mit großen Ladungszahlen  $Z$  (z.B. bei Blei) vorherrscht. Bei der jj-Kopplung ist die elektrostatische Wechselwirkung aller Elektronen klein im Vergleich zur Summe aller Spin-Bahn-Wechselwirkungen einzelner Elektronen, die Kopplung zwischen  $\vec{l}_i$  und  $\vec{s}_i$  eines einzelnen Elektrons mit Index  $i$  immer stärker, da diese gemäß Feinstrukturaufspaltung mit der Kernladungszahl  $Z^4$  skaliert. Der Gesamtdrehimpuls  $\vec{L}$  und Gesamtspin  $\vec{S}$  sind nicht mehr definiert, man sagt „die LS-Kopplung bricht auf“.

$$\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i$$

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

$$\vec{J} = \sum_i \vec{j}_i$$

In der Regel ist die LS-Kopplung bzw. die jj-Kopplung nur in den Grenzfällen sehr kleiner bzw. sehr großer Kernladungszahl  $Z$  erfüllt. Für mittlere Kernladungszahlen liegt eine Mischung der einzelnen Kopplungsvarianten in einem Atom vor.

- Aufgaben**
1. Wie koppeln die Drehimpulse der Elektronen untereinander? (Skript)
  2. Wann gilt welche Art der Kopplung und warum? (Skript)
  3. Zwei äquivalente p-Elektronen haben eine starke Spin-Bahn-Kopplung. Bestimmen Sie die möglichen Werte des resultierenden Drehimpulses  $\vec{J}$  unter der Annahme der j-j-Kopplung. Wiederholen Sie die Aufgabe unter Annahme von L-S-Kopplung. Tritt derselbe Wert von  $J$  in beiden Fällen gleich häufig auf? (Alonso/Finn)
  4. In L-S-Kopplung kann man das magnetische Moment eines Atoms zu  $M = -\frac{e}{2m_e}g\vec{J}$  erhalten. Dabei ist  $J$  der Gesamtdrehimpuls des Atoms, und  $g = 1 + \frac{\vec{S}\vec{J}}{J^2} = 1 + \frac{J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}$ . Berechnen Sie  $g$  für Kalzium und Aluminium. Untersuchen Sie die Aufspaltung eines 3p-Terms in einem schwachen Magnetfeld. Bestimmen Sie ebenfalls die Aufspaltung in einem starken Magnetfeld. (Alonso/Finn)
  5. Diskutieren Sie den Zeemann-Effekt bei schwachen und starken Magnetfeldern für die Übergänge  ${}^3F \rightarrow {}^3D$  und  ${}^1F \rightarrow {}^1D$  in Kalzium. (Alonso/Finn)
  6. Die relative Aufspaltung der verschiedenen Niveaus eines L-S-J-Multiplets infolge der Spin-Bahn-Wechselwirkung kann als proportional zu  $\vec{S}\vec{L}$  angenommen werden. Wenden Sie diese Beziehung auf die  ${}^3F$ - und  ${}^3D$ -Multipletts an. Zeichnen Sie die Energieniveaus dieser Multipletts und deuten Sie durch die Pfeile die erlaubten Übergängen an. (Alonso/Finn)

- Literatur**
- Skript S. 138-143
  - Demtröder S. 201-205
  - Alonso/Finn S. 180-187