Når er spinn-bane kobling viktig?

Se på tilfellet med null B-felt.

$$\underline{\underline{H}} = \frac{p^2}{2m} + q\varphi + \frac{q\hbar}{4m^2c^2}(\vec{\nabla}\varphi \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma}$$

φ: Elektrisk potensial som elektronet beveger seg i. For å få en idé om når spinn-banekobling er viktig, ser vi først på tilfellet med et elektron i H-likt atom.

$$\varphi = \frac{+eZ}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}$$

Ze: kjerneladning

$$\vec{\nabla}\varphi = -\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\vec{r}}{r^3}$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} + \frac{Ze^2\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r^3}(\vec{r} \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma}$$

Se på koeffisienten til $\vec{r} \times \vec{p} \cdot \vec{S}$ der $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$. Den er:

$$\frac{Ze^2}{8m^2c^2\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r^3} \simeq \frac{Ze^2}{8m^2c^2\pi\varepsilon_0}\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle$$

②

Vi ser at dette øker med Z (dvs. øker med atomnummer, grovt sett øker med atommassen)

Koeffisienten $\sim Z \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$

Når Z øker, trekkes elektronet nærmere kjernen, slik at $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$ øker, i tillegg til faktoren Z.

Konklusjon: Spinn-bane kobling viktigst når atom-massen er stor.

Se nå på et elektron i et periodisk ione-krystall, ψ.
For å få litt mer innsikt i hva ψ er, ser vi på Hamilton-funksjonen for et system av elektroner og ioner, ikke-relativistisk, siden en ikke-rel. tilnærming til ψ bør være godt nok i vårt tilfelle.

$$H = \underbrace{\sum_i \frac{p_i^2}{2m_e}}_{\substack{\text{Kin. en.} \\ \text{elektroner}}} + \underbrace{\sum_j \frac{P_j^2}{2M_{ion}}}_{\substack{\text{Kin. en.} \\ \text{protoner}}}$$

$$+ \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}}_{\substack{\text{Coulomb-v.v.} \\ \text{mellom elektroner}}}$$

$$+ \underbrace{\frac{Z^2 e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{1}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|}}_{\substack{\text{Coulomb-v.v.} \\ \text{mellom } \cancel{\text{protoner}} \text{ ioner}}}$$

$$- \underbrace{\frac{Z e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j|}}_{\substack{\text{Coulomb-v.v.} \\ \text{mellom elektroner og ioner}}}$$

Coulomb-v.v. mellom ionene $\Rightarrow$ krystall: $\vec{R}_i \to R_i^0$, der R_i^0 er likevektsposisjonene i krystallet. Coulomb-v.v. mellom elektroner og ioner gir da opphav til et periodisk krystallpotensial som ~~ionene~~ elektronene beveger seg i.

$$-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2}\sum_{i,j}\frac{1}{|\vec{r}_i-\vec{R}_j^0|}$$

$$= \sum_i V_{xtal}(\vec{r}_i)$$

$$V_{xtal}(\vec{r}_i) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2}\sum_j\frac{1}{|\vec{r}_i-\vec{R}_j^0|}$$

$$= -e\varphi(\vec{r}_i)$$

$$\varphi(\vec{r}_i) = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2}\sum_j\frac{1}{|\vec{r}_i-\vec{R}_j^0|}$$

$$\nabla\varphi(\vec{r}) = -\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2}\sum_j\frac{(\vec{r}-\vec{R}_j^0)}{|\vec{r}_i-\vec{R}_j^0|^3}$$

Igjen så vi at $\bar{\nabla}\varphi$ øker med Z, både p.g.a. prefaktoren Z, men også fordi at

$$\frac{(\vec{r}_i - \vec{R}_j^{\,0})}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j^{\,0}|^3}$$

<u>øker</u> når avstanden mellom elektron og ion <u>minker</u>. Konklusjonen blir at i systemer med tunge ionemasser og der elektron-båndene er bygd opp av atom-orbitaler som ligger nære kjernen, blir spinn-bane kobling viktig.