# NOTIZEN

## Magnetische Wechselwirkung der Elektronen

Martha Heitzmann

(Z. Naturforsch. **30 a**, 1776–1777 [1975]; eingegangen am 31. Juli 1975)

*Magnetic Interaction of Electrons*

Electrons have, besides their charges, spins with magnetic dipolmoments. Therefore there are also magnetic forces, attractive or repulsive, between these particles at low distances. According to the position of the moments there is a distance in which the magnetic attraction has the same absolute value as the electric repulsion and will be larger at lower distances. This is discussed in the context of the formation of atoms, negative ions and molecules.

Beim Zweielektronenproblem des Wasserstoffmoleküls wird in der bekannten Heitler-London-Theorie für die gegenseitige Beeinflussung der Elektronen nur das Potential der abstoßenden Coulomb-Kraft in den Hamilton-Operator eingesetzt. Da Bahndrehimpulse fehlen, werden die mit den Spins zusammenhängenden Wechselwirkungen nur über das Pauli-Prinzip bei der Auswahl der Eigenfunktionen berücksichtigt. Die mit Hilfe des Austauschintegrals erhaltene Bindung gilt aber nicht für andere Moleküle.

Ein Ausdruck für die gesamte Wechselwirkung zweier Elektronen wird bei Slater [1] und bei Bethe und Salpeter [2] aus den Dirac-Gleichungen abgeleitet. Der Operatorausdruck enthält außer der eigenen und der gegenseitigen Spin-Bahn-Wechselwirkung ein Spin-Spin-Glied, das die gleiche Form hat wie das Potential zweier Dipole. Da hier anstelle der Dipolmomente die Paulischen Spinmatrizen stehen, ergibt die Anwendung auf die Singulettspinfunktion Null. Daher wird ein Zusatzglied angefügt, das ein Produkt der beiden Spinoperatoren mit der Diracschen Delta-Funktion des Abstandes ist:

$$-\frac{8\pi}{3}\,\sigma_1\,\sigma_2\,\delta(r_{1,2})\,.$$

Um den sehr kleinen Bereich zu ermitteln, in dem die Delta-Funktion ungleich Null ist, bleibt die Möglichkeit, auf die mit den Spins verbundenen magnetischen Momente zurückzugreifen.

Im folgenden wird nicht der Verlauf der gegenseitigen potentiellen Energie angegeben, sondern nur die Entfernung zweier Elektronen, bei der dieses Potential die gleiche Größe wie das Coulomb-Potential hat.

Die potentielle Energie zweier Dipole mit den Momenten $\boldsymbol{m}_1$ und $\boldsymbol{m}_2$, die der Einfachheit halber in einer Ebene liegen sollen, wird durch folgende Formel beschrieben:

$$U=\frac{1}{r_{1,2}^3}\,[(\boldsymbol{m}_1\,\boldsymbol{m}_2)-3(\boldsymbol{m}_1\,\boldsymbol{e})\,(\boldsymbol{m}_2\,\boldsymbol{e})]\,;$$

$r_{1,2}$ ist der Betrag des gegenseitigen Abstandes und $\boldsymbol{e}$ der zugehörige Einheitsvektor. Für zwei solche Dipole gibt es vier durch das Fehlen von Drehmomenten ausgezeichnete Lagen. In zwei solchen Lagen hat die Kraft anziehende Richtung und das Potential einen negativen Wert. Für die im folgenden als Stellung I bezeichnete Lage mit antiparallelen, nebeneinanderliegenden Momenten steht der Abstandsvektor senkrecht zu den Momentvektoren, so daß das zweite Glied im Energieausdruck Null ergibt. Das verbleibende erste negative Glied könnte dann dem im Wechselwirkungsoperator zugefügten Glied mit der Delta-Funktion entsprechen. Bedeutung gewinnt dieses Potential erst dann, wenn es größer als die Coulombsche Abstoßung wird. Mit dem Wert des magnetischen Moments des Elektrons erhält man für die Stellung I bei einem Abstand von etwa $1{,}9\cdot10^{-11}$ cm Gleichwertigkeit der Potentiale, bei kleineren Abständen überwiegt die Anziehung durch die magnetischen Momente.

Für die Stellung II, bei der die Momente gleichgerichtet hintereinanderliegen, reicht das Überwiegen der Anziehungskraft bis zu einem Abstand von etwa $2{,}7\cdot10^{-11}$ cm.

Bei größerer Entfernung kann noch eine Ausrichtung möglich sein, aber die elektrische Abstoßung überwiegt.

Die angegebenen Abstände von 1,9 und $2{,}7\cdot10^{-11}$ cm sind sowohl mit der Größe der Atome als auch mit der Größe der Elektronen verträglich; die Anziehungskräfte der magnetischen Momente könnten sich also durchaus in der Atomhülle bemerkbar machen. Läßt man wenigstens im zeitlichen Mittel für die S-Schalen so kleine Entfernungen zu, wie sie für die Stellung I nötig sind, dann wird, weil die antiparallel nebeneinanderliegenden Momente ihr Feld nach außen auslöschen, auf kein weiteres Teilchen eine Anziehungskraft ausgeübt. Damit ist die zweifache Besetzung dieser Schalen und Unterschalen erklärbar.

Nimmt man weiterhin an, daß in den Schalen mit größeren Quantenzahlen und Bahndrehimpulsen un-

Sonderdruckanforderungen an Dr. M. Heitzmann, *D-3300 Braunschweig*, Bundesallee 100.

gleich Null im Mittel gegenseitige Entfernungen vorkommen, bei denen Anziehung nur noch in der Stellung II möglich ist, dann erfolgt diese mit ausgerichteten Momenten, wie es nach der Hund'schen Regel bis zur halben Besetzung möglich ist. Da die Momente sich jetzt addieren, können die restlichen Teilchen trotz der etwas größeren Entfernungen wieder mit antiparallel zu den ersten liegenden Momenten angezogen werden. Der Schalenabschluß mit völlig ausgelöschten Momenten ist dann ebenfalls geradzahlig.

Die Bevorzugung der Stellung I bei kleineren Entfernungen kann hier vorerst nur mit dem Pauli-Prinzip begründet werden.

Die Möglichkeit, bei kleinen Entfernungen und richtiger Lage eine Anziehung der magnetischen Dipole zu haben, die die Coulomb-Abstoßung übersteigt, besteht grundsätzlich für alle Elektronen. Man hat damit eine einfache Erklärung für die Tatsache, daß eine unabgeschlossene Schale auch durch die Elektronen anderer Atome aufgefüllt werden kann. In gewissen Fällen kann ein einzelnes Elektron eines anderen Atoms abgetrennt werden und mit ersterem ein negatives Ion bilden. Auch die Bildung von Molekülen gleicher Atome wird somit verständlich, natürlich nur, wenn unabgeschlossene Schalen vorliegen wie bei Wasserstoff, Stickstoff usw. Helium dagegen bildet im Grundzustand kein Molekül.

Herrn Professor Dr. F. Rogowski danke ich für Diskussionen über die Molekülbindung und anregende Hinweise und Herrn Dr. W. Kaul, der mir die Größenordnung der angegebenen Entfernungen bestätigte.

[1] J. C. Slater, Quantum Theorie of Atomic Structure II, Seite 195, Zusatzglied Appendix 30, Seite 368.

[2] H. A. Bethe u. E. E. Salpeter, Handbuch der Physik (S. Flügge), Band XXXV.