

15. Die Feinstruktur des Wasserstoff-Spektrums

relativist. Korrekturen zu $E_n = -\frac{Ry}{n^2}$! (12.24)

Hamiltonian:

$$H = H_0 + \underbrace{H_{SB} + H_K + H_D}_{H_R \dots \text{relativ. Korrekt.}} \quad \text{H-Atom} \quad (15.1)$$

mit $H_0 = \frac{p^2}{2m} + U(r)$ mit $U(r) = -e\varphi(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$

$$H_{SB} = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial U(r)}{\partial r} \underline{L} \cdot \underline{S} \dots \text{Spin-Bahn-Kopplung}$$

$$H_K = -\frac{1}{8} \frac{(p^2)^2}{m^3c^2} \dots \text{relativ. Korrektur der kinet. Energie}$$

$$H_D = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 U(r) = -\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \frac{1}{\epsilon_0} \rho(r) \dots \text{„Darwin-Term“}$$

$\nabla^2 \varphi = \frac{1}{\epsilon_0} \rho(r)$ ← Kernladungsdichte

NB: (i) H_{SB} ... s. (13.15)

(ii) relativ. Energie:

$$E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} \approx mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{8} \frac{(p^2)^2}{m^3c^2} + \dots \quad (15.2)$$

(iii) H-Atom: $\rho(r) = e\delta(r)$ in H_D → H_K

Wie ist $\underline{L} \cdot \underline{S}$ in H_{SB} zu behandeln?

15.1 Addition von Drehimpulsen

Gesamt Drehimpuls: $\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}$ (13.6) wirkt im Raum $\mathbb{R} \otimes \mathbb{R}_{1/2}$

mit $J|X\rangle = J(|\uparrow\rangle|\eta\rangle) = \underline{L}|\uparrow\rangle|\eta\rangle + |\uparrow\rangle\underline{S}|\eta\rangle$ (15.3)

[vgl. Kap. 13.4b)]

• Vertauschungsrelationen:

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k, \quad [S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k$$

$$[\underline{L}, \underline{S}] = 0 \quad (15.4)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow & [J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k \\ \rightarrow & \text{also: } J^2 |jm\rangle = j(j+1)\hbar^2 |jm\rangle \\ & J_z |jm\rangle = m\hbar |jm\rangle, \quad m = -j \dots j \end{aligned} \quad (15.5)$$

• Produktzustände: $|l m_l\rangle |s m_s\rangle = |l m_l s m_s\rangle$ (15.6)

(i) sind EU zu $\underline{L}^2, L_z, \underline{S}^2, S_z$

(ii) sind EU zu J_z :

$$\underbrace{J_z}_{L_z + S_z} |l m_l s m_s\rangle = \underbrace{(m_l + m_s)\hbar}_m |l m_l s m_s\rangle \quad (15.7)$$

(iii) sind keine EU zu $J^2 = (\underline{L} + \underline{S})^2 = \underline{L}^2 + \underline{S}^2 + 2\underline{L} \cdot \underline{S}$

$$L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z$$

bzw: $[J^2, S_z] \neq 0$

$[J^2, L_z] \neq 0$

• besser: Wähle

$$\begin{array}{l} \text{Kommutierende Observable} \\ J^2, J_z, \underline{L}^2, \underline{S}^2 \quad \longrightarrow \quad \text{EU } |j m_l s\rangle \end{array}$$

(15.7b)

Entwickle im
Raum

$$\underbrace{\mathbb{R}_L \otimes \mathbb{R}_{1/2}}_{\subset \mathcal{H}}$$

$$|j m_l s\rangle = \sum_{m_l=-l}^l \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} |l m_l s m_s\rangle \underbrace{\langle l m_l s m_s | j m_l s \rangle}_{\text{Clebsch-Gordan}}$$

Dimension: $(2l+1) \times 2$

Koeff.

• Geg: $l, s = \frac{1}{2}$

Ges: $j, m?$ mit $m = m_1 + m_2$ (15.7)

Tabellen

m_1	m_2	$m = m_1 + m_2$
l	$\frac{1}{2}$	$l + \frac{1}{2}$
$l-1$	$\frac{1}{2}$	$l - \frac{1}{2}$
l	$-\frac{1}{2}$	
\vdots	\vdots	$-(l - \frac{1}{2})$
$-l+1$	$-\frac{1}{2}$	
$-l$	$\frac{1}{2}$	$-(l + \frac{1}{2})$
$-l$	$-\frac{1}{2}$	

} je 2 fach

→ alle Zustände $|j, m, l, s\rangle$ zu

(i) $j = l + \frac{1}{2}$
 $m = -(l + \frac{1}{2}) \dots l + \frac{1}{2}$

(ii) $j = l - \frac{1}{2}$
 $m = -(l - \frac{1}{2}) \dots l - \frac{1}{2}$

(15.8)

Anzahl: $2(l + \frac{1}{2}) + 1 + 2(l - \frac{1}{2}) + 1 = (2l+1) \times 2 = \dim(\mathcal{R}_l \otimes \mathcal{R}_{\frac{1}{2}})$

• allgemein: $J = J_1 + J_2$

Zustände $j_1, j_2 \rightarrow j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_2 - j_1|$ (15.9)

15.2. Störungstheorie für $H_0 + H_{SB}$

• ungestörtes Problem: H-Atom / Alkaliatom [s. Kap. 12.2]

$H_0 R_{nl}(r) |l, m_l, s, m_s\rangle = E_{nl} R_{nl}(r) |l, m_l, s, m_s\rangle$ (15.10)

$H_0 R_{nl}(r) |j, m, l, s\rangle = E_{nl} R_{nl}(r) |j, m, l, s\rangle$

H-Atom: $E_{nl} = E_n$

• Stör-Hamiltonian: $H_{SB} = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r} \underline{L} \cdot \underline{S}$ (15.11)

mit $\underline{L} \cdot \underline{S} = \frac{1}{2} (J^2 - L^2 - S^2)$ (15.12)

denn: $J^2 = (L+S)^2 = L^2 + 2L \cdot S + S^2$

• EV zu $L \cdot S$: mit (15.12)

$$\rightarrow \boxed{L \cdot S |jmls\rangle = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] |jmls\rangle \quad (15.13)}$$

$$\left[\begin{array}{l} s = \frac{1}{2} \\ j = l \pm \frac{1}{2} \end{array} \right] = \left. \begin{array}{l} l \\ -(l+1) \end{array} \right\} \hbar^2 |jmls\rangle$$

• Störungstheorie 1. Ordnung für Energie-EW:

(i) E_{nl} ist entartet, aber $\langle jmls | H_{SB} | j'm'l's \rangle \sim \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$ (15.13)

$\rightarrow |jmls\rangle$ passende EV für Störungstheorie!

(ii) $\Delta E_{nj} \stackrel{(14.11)}{=} \langle R_{nl} | jmls | H_{SB} | R_{nl} | jmls \rangle$

$\stackrel{(15.11)}{=} \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \langle R_{nl} | \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r} | R_{nl} \rangle [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$

(15.14)

$$\left[\begin{array}{l} s = \frac{1}{2} \\ j = l \pm \frac{1}{2} \end{array} \right] = \left. \begin{array}{l} l \\ -(l+1) \end{array} \right\} \hbar^2$$

(iii) H-Atom: mit $U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$

und $\langle R_{nl} | \frac{1}{r^3} | R_{nl} \rangle \stackrel{o.B.}{=} \frac{1}{a_B^3} \frac{1}{n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)}$ (15.15)

$$\Delta E_{njl} = \frac{1}{2} \underbrace{|E_{nl}|}_{Ry/n^2} \alpha^2 \frac{1}{n l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \left[\begin{array}{l} l \\ -(l+1) \end{array} \right] \quad , \quad l \geq 1$$

$$\Delta E_{nj0} = 0 \quad , \quad l=0$$

mit $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137,037} \dots$ Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante

NB: in Kap. 12.2g): α in cgs-Einheiten

15.3 Feinstruktur des H-Atoms

Störungstheorie für $H_{SB} + H_K + H_0$

o.B.
Bsp: Schwabl

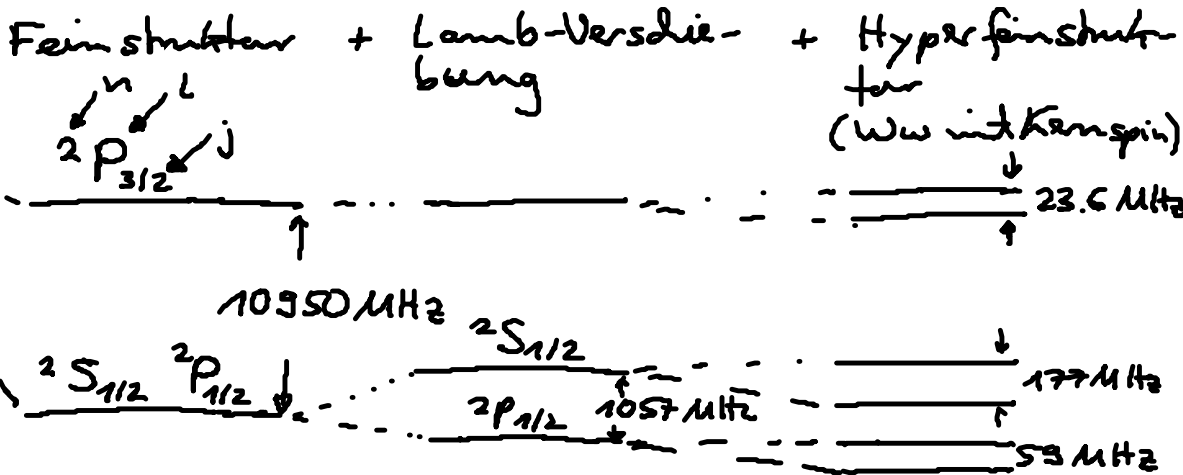
$$\Delta E_{nj} = |E_n| \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j + \frac{1}{2}} \right)$$

Bem: (i) Entartung in l für gleiche j

(ii) $\frac{\Delta E_{nj}}{|E_n|} \sim \alpha^2 = 5 \cdot 10^{-5}!$

Bsp:

$n=2, l=0,1$



weitere Störungen:

H-Atom im Magnetfeld
↓
Zeeman-Effekt

und im elektr. Feld
↓
Stark-Effekt