15. Die Feinstruktur des Wasserstoff-Spektrums

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

- Hamiltonian:

$$\boxed{\begin{aligned} H &= H_0 + \underbrace{H_{SB} + H_K + H_D}_{H_R \text{ ... relativ. Korrekturen}} \\ \text{mit } H_0 &= \frac{p^2}{2m} + U(r) \text{ mit } U(r) = -e\varphi(r) \overset{\text{H-Atom}}{=} -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \\ H_{SB} &= \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\partial U(r)}{\partial r}\,\underline{L}\cdot\underline{S} \text{ ... Spin-Bahn-Kopplung} \\ H_K &= -\frac{1}{8}\frac{(p^2)^2}{m^3c^2} \text{ ... relativ. Korrektur der kinet. Energie} \\ H_D &= \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2 U(r) \underset{\nabla^2\varphi = \frac{1}{\varepsilon_0}\rho(\underline{r})}{=} -\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\frac{1}{\varepsilon_0}\rho(\underline{r}) \text{ ... „Darwin-Term"} \end{aligned}} \qquad (15.1)$$

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

(ii) relativ Energie:

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} \approx mc^2 + \frac{p^2}{2m} \underbrace{- \frac{1}{8}\frac{(p^2)^2}{m^3c^2}}_{\to H_K} \qquad (15.2)$$

(iii) H-Atom: $\rho(\underline{r}) = e\,\delta(\underline{r})$

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

15.1 Addition von Drehimpulsen

- Gesamtdrehimpuls: $\boxed{\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}}$ (13.6) wirkt im Raum $\mathcal{H} \otimes \mathbb{C}_{1/2}$

mit $\underline{J}\,|\chi\rangle = \underline{J}\,|\psi\rangle|\eta\rangle = \underline{L}\,|\psi\rangle|\eta\rangle + |\psi\rangle\,\underline{S}\,|\eta\rangle$ (15.3)

· Vertauschungsrelationen:

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

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

$$\longrightarrow \quad \boxed{[J_i, J_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk} J_k} \qquad (15.5)$$

$\longrightarrow$ also: $\underline{J}^2 |jm\rangle = j(j+1)\hbar^2 |jm\rangle$

$J_z |jm\rangle = m\hbar\,|jm\rangle\,, \quad m = -j \dots j$

· Produktzustände: $|lm_l\rangle|sm_s\rangle = |lm_l\,sm_s\rangle$ (15.6)

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

(ii) sind EV zu J_z:

$$\boxed{\underbrace{J_z}_{L_z+S_z} |lm_l\,sm_s\rangle = \underbrace{(m_l+m_s)}_{m}\hbar\,|lm_l\,sm_s\rangle} \qquad (15.7)$$

(iii) sind <u>keine</u> EV zu $\underline{J}^2 = (\underline{L}+\underline{S})^2 = \underline{L}^2 + \underline{S}^2 + 2\underbrace{\underline{L}\cdot\underline{S}}_{L_xS_x + L_yS_y + L_zS_z\,!}$

NB: $[\underline{J}^2, S_z] \neq 0$

$[\underline{J}^2, L_z] \neq 0$

· <u>bessere</u>: Wähle

kommutierende Observable

$\underline{J}^2, J_z, \underline{L}^2, \underline{S}^2 \longrightarrow$ EV $|jmls\rangle$

Entwickle im Raum $\underbrace{R_l \otimes R_{1/2}}_{\mathcal{H}}$

$$|jmls\rangle = \sum_{m_l=-l}^{l} \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} |lm_l\,sm_s\rangle \underbrace{\langle lm_l\,sm_s | jmls\rangle}_{\text{Clebsch-Gordon-Koeffizient}}$$

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

· Geg: $l, s = \frac{1}{2}$ Ges: j, m ? mit $m = m_l + m_s$ (15.7)

Tabelle:

m_l	m_s	$m = m_l + m_s$
l	$\frac{1}{2}$	$l+\frac{1}{2}$
$l-1$	$\frac{1}{2}$	$l-\frac{1}{2}$
l	$-\frac{1}{2}$	
$\vdots$		
$-l+1$	$-\frac{1}{2}$	$-(l-\frac{1}{2})$
$-l$	$\frac{1}{2}$	
$-l$	$-\frac{1}{2}$	$-(l+\frac{1}{2})$

je 2 fach

$\longrightarrow$ alle Zustände $|jm\,l\,s\rangle$ zu

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{(i)}\ \ j = l+\frac{1}{2} \\ \qquad m = -(l+\frac{1}{2}) \ldots l+\frac{1}{2} \\ \text{(ii)}\ \ j = l-\frac{1}{2} \\ \qquad m = -(l-\frac{1}{2}) \ldots l-\frac{1}{2} \end{array}} \qquad (15.8)$$

Anzahl: $2(l+\frac{1}{2})+1 + 2(l-\frac{1}{2})+1 = (2l+1)\times 2 = \dim(R_l \otimes R_{1/2})$

- allgemein: $\underline{J} = \underline{J}_1 + \underline{J}_2$

$$\boxed{\text{Zustände zu } j_1, j_2 \longrightarrow j = j_1+j_2,\ j_1+j_2-1,\ \ldots,\ |j_1-j_2|} \qquad (15.9)$$

15.2 Störungstheorie für $H_0 + H_{SB}$

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

$$\boxed{\begin{array}{ll} H_0\, R_{nl}(r)\,|l m_l\, s m_s\rangle = E_{nl}\, R_{nl}(r)\,|l m_l\, s m_s\rangle & \\ \text{bzw}\quad H_0\, R_{nl}(r)\,|jm\,l\,s\rangle = E_{nl}\, R_{nl}(r)\,\underbrace{|jm\,l\,s\rangle}_{\text{Linearkomb. der } |l m_l\, s m_s\rangle} & \end{array}} \qquad (15.10)$$

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

- Stör-Hamiltonian: $H_{SB} = \frac{1}{2m^2c^2}\,\frac{1}{r}\,\frac{\partial U}{\partial r}\,\underline{L}\cdot\underline{S}$ (15.11) mit $\underline{L}\cdot\underline{S} = \frac{1}{2}\left(\underline{J}^2 - \underline{L}^2 - \underline{S}^2\right)$ (15.12)

denn: $\underline{J}^2 = (\underline{L}+\underline{S})^2 = \underline{L}^2 + \underline{S}^2 + 2\,\underline{L}\cdot\underline{S}$

· EV zu $\underline{L}\cdot\underline{S}$:

$$\longrightarrow \quad \boxed{\begin{aligned} \underline{L}\cdot\underline{S}\,|jmls\rangle &= \frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right]|jmls\rangle \\ \left[\begin{matrix} s=\frac12 \\ j=l\pm\frac12\end{matrix}\right] &= \left.\begin{matrix} l \\ -(l+1)\end{matrix}\right\}\hbar\,|jmls\rangle \end{aligned}} \qquad (15.13)$$

· Störungstheorie 1. Ordnung für Energie-EW:

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

$\longrightarrow$ $|jmls\rangle$ passenden EV für Störungstheorie!

(ii) $\Delta E_{njl} \overset{(14.11)}{=} \langle R_{nl}\,jmls|H_{SB}|R_{nl}\,jmls\rangle$

$$\underset{(15.13)}{\overset{(15.11)}{=}} \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\langle R_{nl}|\frac{1}{r}\frac{\partial U}{\partial r}|R_{nl}\rangle\left[j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)\right] \qquad (15.14)$$

$$\left[\begin{matrix} s=\frac12 \\ j=l\pm\frac12\end{matrix}\right] = \quad \text{''} \quad \begin{cases} l \\ -(l+1)\end{cases}$$

(iii) H-Atom: mit $U = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}$

und $\langle R_{nl}|\frac{1}{r^3}|R_{nl}\rangle \overset{\text{o.B.}}{=} \frac{1}{a_B^3}\,\frac{1}{n^3\,l(l+\frac12)(l+1)}$ (15.15)

$$\longrightarrow \quad \boxed{\begin{aligned} \Delta E_{njl} &= \frac12 \underbrace{|E_n|}_{Ry/n^2}\,\alpha^2\,\frac{1}{n\,l(l+\frac12)(l+1)}\begin{cases} l \\ -(l+1)\end{cases}, \quad l\geq 1 \\ \Delta E_{njl} &= 0, \quad l=0 \\ \text{mit } \alpha &= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137{,}037}\ \ldots \ \text{Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante} \end{aligned}} \qquad (15.16)$$

SI-Einheiten

Kap. 12.2 g): α in cgs-Einheiten

15.3 Feinstruktur des H-Atoms

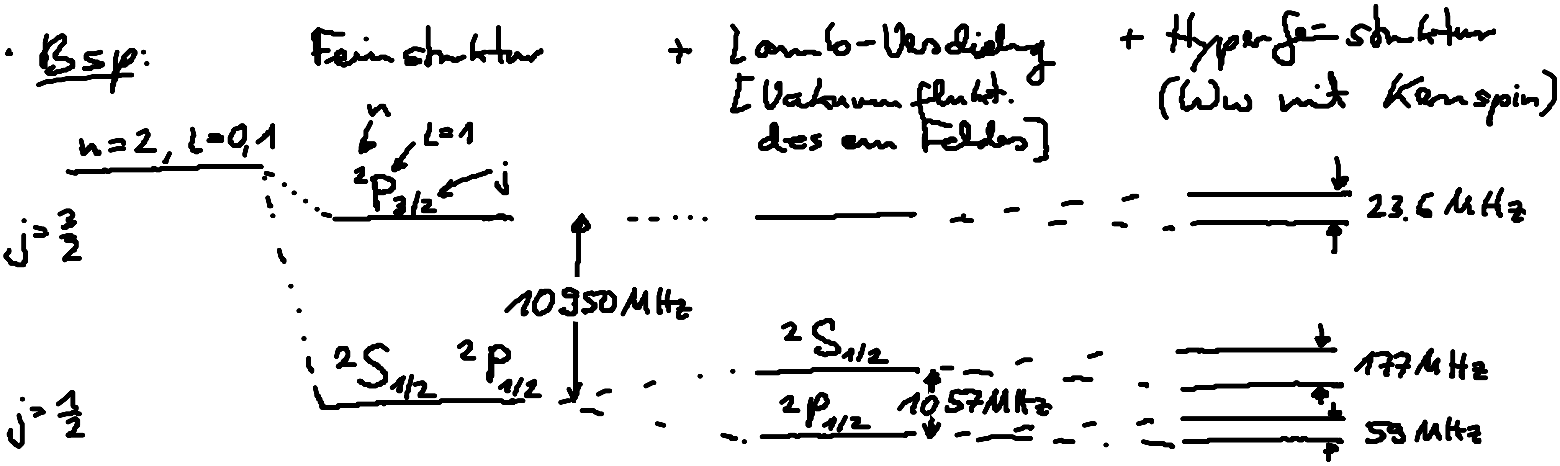
• Störungstheorie für $H_{SB} + H_K + H_D$:

$\xrightarrow[\text{Bsp: Schwabl}]{\text{o.B.}}$ $$\boxed{\Delta E_{nj} = |E_n| \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j+\frac{1}{2}} \right)}$$

Bem.: (i) Entartung in l für gleiche j

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

• Bsp:



• weitere Störungen:

H-Atom im Magnetfeld $\downarrow$ Zeeman-Effekt

und

im elektr. Feld $\downarrow$ Stark-Effekt