4.3 Beiträge der relativistischen Korrekturen zur Feinstruktur des H-Atoms

wissen bereits: $\underline{H}_{Atom} = \frac{p^2}{2m} + \phi_{Kern}(r)$

$$\underline{H}_{Atom} \, | n \, l \, s = \tfrac{1}{2}, m_l, m_s \rangle = E_n \, | n, l, s = \tfrac{1}{2}, m_l, m_s \rangle$$

$$\underline{H}_{Atom} \, | n, l, s = \tfrac{1}{2}, j, m_j \rangle = E_n \, | n, l, s = \tfrac{1}{2}, j, m_j \rangle$$

$E_n = - Ryd / n^2$ analog QM I

es macht Sinn in m_j, j zu arbeiten um die relativistisch Korrekturen (H_{S-B}, H_{Darwin}, H_{p^4}) ohne Komplikationen in Störungstheorie zu bearbeiten, weil j, m_j gute QZ sind, die die Eigenfunktion von H_{S-B} sind. (H_{S-B} ist sogar exakt).

a) Spin-Bahn Wechselwirkg.

Elektronladg. e^2

Elektron

$$H_{S-B} = \frac{q}{2 m_0^2 c^2} \frac{1}{r} \phi'(r) \, \vec{l} \cdot \vec{s} = \frac{q^2}{2 m_0^2 c^2 4\pi \varepsilon_0} \frac{1}{r^3} \underline{\underline{\vec{l} \cdot \vec{s}}}$$

Proton und $q = -e$

$$\langle H_{SB} \rangle = \langle n, l, s = \tfrac{1}{2}, m_j, j \,|\, H_{SB} \,|\, n, l, s = \tfrac{1}{2}, m_j, j \rangle$$

$$= \underbrace{\langle n, l \,|\, \frac{1}{r^3} \,|\, n, l \rangle}_{} \langle l, j, m_j, s = \tfrac{1}{2} | \underline{\underline{\vec{l} \cdot \vec{s}}} \, | l, j, m_j, s = \tfrac{1}{2} \rangle \cdot \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \; 2 m_0^2 c^2}$$

mit $|n, l\rangle = R_{nl}(r)$

folgt mit ÜA

$$\vec{j} = (\vec{l} + \vec{s})$$

$$= \frac{1}{l(l+\frac{1}{2})(l+1) n^3 a^3}$$

$\left(a = \frac{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0}{m e^2} \text{ Bohrsche Radius} \right)$

$l \neq 0$

$$\vec{l} \cdot \hat{\vec{s}} = \frac{1}{2} \left(\hat{\vec{j}}^2 - \vec{l}^2 - \hat{\vec{s}}^2 \right)$$

zur Eingrenzung ~ $\hat{1}$

$$\langle \vec{l} \cdot \hat{s} \rangle = \frac{1}{2} \left(\hbar^2 \underbrace{j(j+1)}_{\text{Zahlen}} - \hbar^2 l(l+1) - \frac{3}{4} \hbar^2 \right)$$

<u>Achtg</u>: $j = l \pm \frac{1}{2}$

$$\langle H_{S\text{-}B} \rangle = \begin{cases} \dfrac{\alpha^2}{2n} |E_n| \dfrac{l}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)} & j = l+\frac{1}{2} \\[2ex] -\dfrac{\alpha^2}{2n} |E_n| \dfrac{l+1}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)} & j = l-\frac{1}{2} \end{cases}$$

α = Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante

$$\alpha = \frac{1}{137}$$

Das ist Korrektur zu E_n, diese geht mit $\alpha^2 |E_n|$, ist eine kleine Zahl, denn α ist klein

- Kommentar zu $l=0$: die genaue Rechnung zeigt

$$\langle H_{S\text{-}B} \rangle_{l=0} = 0 \underset{\substack{\uparrow \\ \text{wenn wie oben}}}{=} \infty \cdot 0$$

Die genaue Behandlg. der Diracgl. zeigt aber, daß für $l = 0$ keine Korrektur entsteht.

<u>b) Darwinterm / Kontaktterm</u>

$H_{Darwin} \sim$ Kernladungsdichte ρ_{Kern}

liefert weitere Korrektur in Störungstheorie:

für $l = 0 \rightarrow R_{nl}(r=0) \neq 0$

dadurch entsteht Überlapp m. Kern

$$\langle H_{S-B} + H_D \rangle = \begin{cases} \dfrac{\alpha^2}{2n} \dfrac{|E_n|}{(l+\frac{1}{2})(l+1)} & l = 0, 1, 2 \cdots n-1 \quad j = l + \frac{1}{2} \\ -\dfrac{\alpha^2}{2n} \dfrac{|E_n|}{l(l+\frac{1}{2})} & l = 1, 2, \cdots, n-1 \quad j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

c) Korrektur durch die relativistische Energie-Impuls Beziehg.

$$H_{p^4} = -\frac{1}{8 m_0^3 c^2} p^4$$

um $\langle H_{p^4} \rangle$ zu berechnen braucht man:

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{n,l} , \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{n,l}$$

$= \frac{1}{n^2 a}$ $\qquad\qquad$ $= \frac{1}{(l+\frac{1}{2}) n^3 a^2}$

ÜA

$$\langle H_{p^4} \rangle = 4 m_0^2 \left(E_n^2 + 2 e^2 E_n \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{n,l} + e^4 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} \right)$$

$= $ Funktion von n, l

d) Alle Korrekturen gemeinsam:

$$\langle H_{\text{relativ}} \rangle \hat{=} \Delta E \Big|_{\text{relativist.}} = \begin{cases} -\frac{\alpha^2}{4n^2} |E_n| \left(\frac{4n}{l+1} - 3 \right) & j = l + \frac{1}{2},\ l = 0,1,2\ldots \\ -\frac{\alpha^2}{4n^2} |E_n| \left(\frac{4n}{l} - 3 \right) & j = l - \frac{1}{2},\ l = 1,2\ldots \end{cases}$$

etwas kompakter:

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

E-Absenkg.

kleine Zahl $\sim \alpha^2$

in Einheit Rydberg.

- Die Energien des relativistisch berechnet H-Atoms sind ein Funktion d. Quantenzahlen n und j.

(j ist neu!)

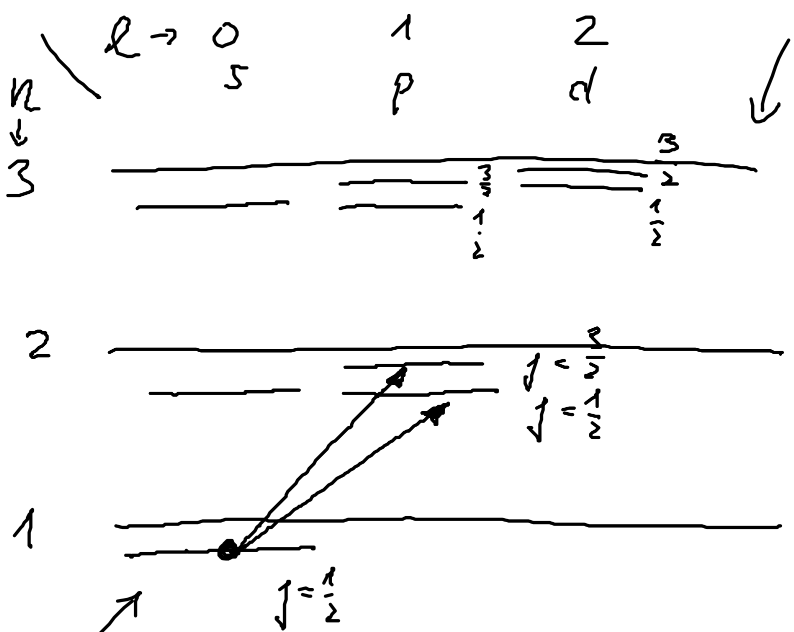
• Weil für jedes l, 2 j's vorliegen, nämlich $j = l \pm \frac{1}{2}$

findet man zu jedem l 2 Energieniveaus die sich unterscheiden

(Dublettstruktur!)

Standard Schrödingertheorie $E = E(n)$

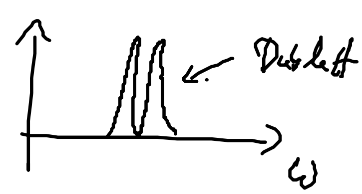
(nicht maßstabsgerecht!)



mit relativistische Korrekturen

optische Übergänge

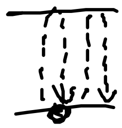
$\Delta l = \pm 1$



Frage: Was machen höhere Korrekturen der Diracgleichung?

Es zeigt sich daß Strahlungskorrekturen ($\vec{A}$)

Zunächst wichtig werden: $\updownarrow$ Φ_{Kern}

 → WW mit Vakuum Strahlungsfeld

„<u>virtuelle</u> Photonenwolke"

→ siehe Quantenfeldtheorie (QED)

<u>Bsp</u>: $n = 2 \quad s, \quad j = \frac{1}{2}$

$n = 2 \quad p, \quad j = \frac{1}{2}$

zeigen verschiedene E-Korrektur durch Strahlungskorrekturen

„Lamb shift"