4.3 Beiträge der relativistischen Korrekturen zur Feinstruktur des H-Atoms

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

$\underline{H}_{Atom} \,|n\, e\, s=\frac{1}{2}, m_e, m_s\rangle = E_n \,|n, e, s=\frac{1}{2}, m_e, m_s\rangle$

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

$E_n = -Ryd/n^2$ 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

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

Proton und $q=-e$

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

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

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

folgt mit ÜA

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

$\left(a = \frac{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0}{me^2}\text{ Bohrsch Radius}\right)$

$l \neq 0$

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

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

zur Einheitsmatrix ~ $\hat{1}$

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

Achtung: $j = l \pm \frac{1}{2}$

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

α = Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante

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

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

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

$$\langle H_{S-B} \rangle_{l=0} = 0 \underset{\uparrow}{=} \infty \cdot 0$$

wenn wie oben

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

b) Darwinterm / Kontaktterm

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

liefert weitere Korrektur in Störungstheorie:

für $\ell = 0 \rightarrow R_{n\ell}(r=0) \neq 0$

dann entsteht Überlapp z. Kern

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

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:

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

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

ÜA

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

= Funktion von n, l

d) Alle Korrekturen gemeinsam:

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

etwas kompakter:

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

E-Absenkung.

kleine Zahl $\sim \alpha^2$

in Einheit Rydberg.

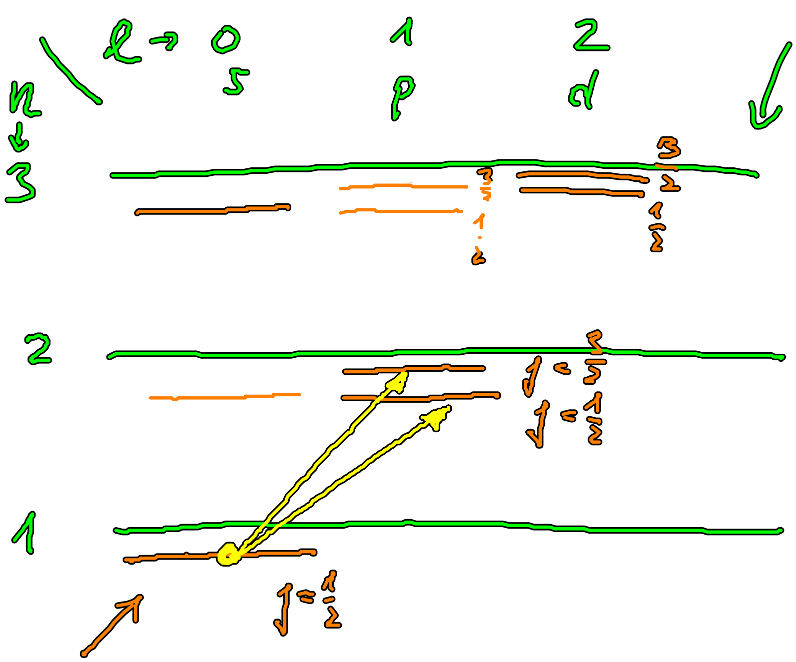
- Die Energien des relativistisch berechneten H-Atoms sind ein Funktion der Quantenzahlen n und j.

(j ist neu!)

- Weil für jedes ℓ, 2 j's vorliegen, nämlich $j = \ell \pm \frac{1}{2}$ findet man zu jedem ℓ 2 Energieniveaus die sich unterscheiden (Dublettstruktur!)

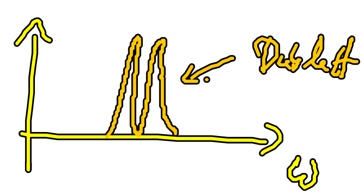
Standard Schrödingertheorie $E = E(n)$

(nicht maßstabsgerecht!)



mit relativistischen Korrekturen

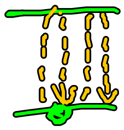
optische Übergänge $\Delta \ell = \pm 1$



Frage: Was machen höhere Korrekturen der Diracgleichung?

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

Zunächst wichtig werden: Φ_{Kern}

 → WW mit Vakuum Strahlungsfeld

„virtuelle Photonenwolke"

→ siehe Quantenfeldtheorie (QED)

Bsp: $n=2$ s, $j=\frac{1}{2}$

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

zeigen verschiedene E-Korrekturen durch Strahlungskorrekturen

„Lamb shift"