

# 15. Die Feinstruktur des Wasserstoff-Spektrums

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

Hamiltonian:

$$H = H_0 + \underbrace{H_{SB} + H_K + H_D}_{H_R \dots \text{relativ. Korrekturen}}$$

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

(15.1)

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

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

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

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

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

(ii) relativ Energie:

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

(iii) H-Atom:  $\rho(r) = e\delta(r) \rightarrow H_K$

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

mit  $\mathcal{J}|\chi\rangle = \mathcal{J}|4\rangle|2\rangle = \underline{L}|4\rangle|2\rangle + |4\rangle \underline{S}|2\rangle$  (15.3)

• Vertauschungsrelationen:

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

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

→

$$[\mathcal{J}_i, \mathcal{J}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \mathcal{J}_k$$

→

$$\text{also: } \mathcal{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle$$

$$\mathcal{J}_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle, \quad m = -j \dots j$$

(15.5)

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

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

(ii) sind EV zu  $\mathcal{J}_z$ :

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

(iii) sind keine EV zu  $\mathcal{J}^2 = (\underline{L} + \underline{S})^2 = \underline{L}^2 + \underline{S}^2 + 2\underbrace{\underline{L} \cdot \underline{S}}_{L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z}!$

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

$[\mathcal{J}^2, L_z] \neq 0$   $\begin{matrix} \circ\circ \\ \circ\circ \end{matrix}$

• bessere: Wähle

$$\text{kommutierende Observable} \\ \mathcal{J}^2, \mathcal{J}_z, \underline{L}^2, \underline{S}^2 \longrightarrow \text{EV } |j, m, l, s\rangle$$

Entwickle  
im Raum  
 $\mathbb{R}_L \otimes \mathbb{R}_{1/2}$   
 $\mathbb{C}^L$   
 $\mathbb{C}^2$

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

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

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

Tabelle:

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

} je 2 fach

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

• allgemein:  $j = j_1 + j_2$

Zustände zu  $j_1, j_2 \rightarrow j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$

(15.9)

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

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

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

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

Linearcomb. der  $|l m_l m_s\rangle$

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

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

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

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

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

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

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

(15.13)

• Störungsreihe 1. Ordnung für Energie - EW:

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

$\rightarrow |j m l s\rangle$  passen bei EV für Störungsreihe!

(ii)  $\Delta E_{njl} \stackrel{(14.11)}{=} \langle R_{nl} | j m l s | H_{SE} | R_{nl} | j m l s \rangle$

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

(15.14)

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

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

und  $\langle R_{nl} | \frac{1}{r^3} | R_{nl} \rangle \stackrel{0.B.}{=} \frac{1}{a_B^3} \frac{1}{n^3 L(L+\frac{1}{2})(L+1)}$  (15.15)

$$\rightarrow \Delta E_{njl} = \frac{1}{2} \underbrace{|E_n|}_{Ry/n^2} \alpha^2 \frac{1}{n L(L+\frac{1}{2})(L+1)} \begin{matrix} l \\ -(l+1) \end{matrix}, \quad l \geq 1$$

(15.16)

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

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

SI-Einheiten

Kap. 12.2 g).  $\alpha$  in cgs-Einheiten

# 15.3 Feinstruktur des H-Atoms

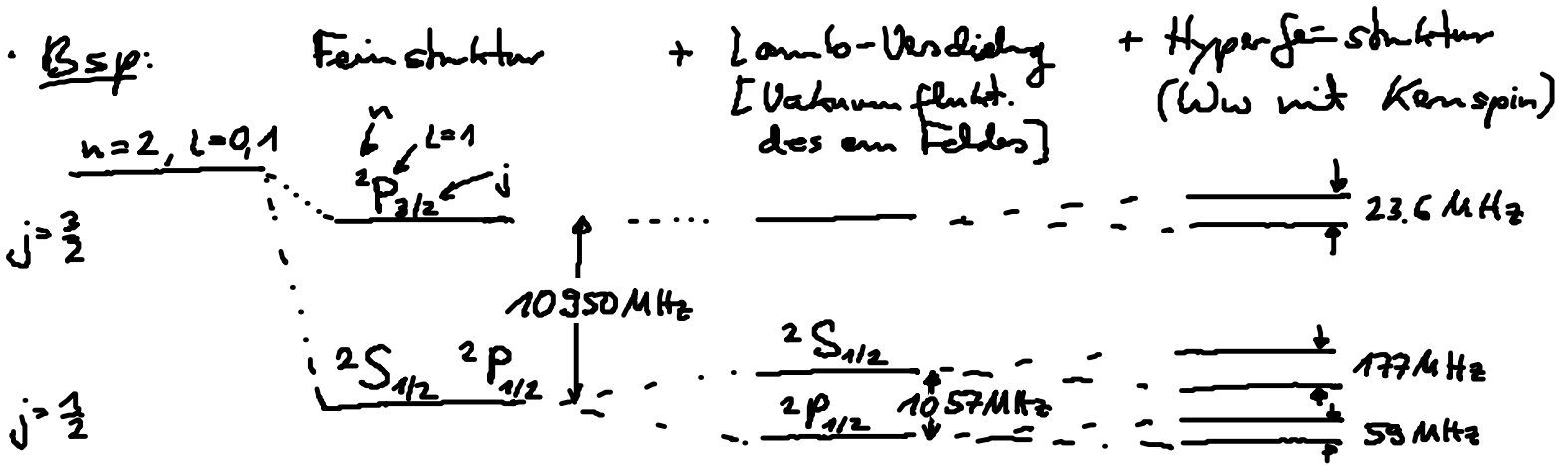
- Störungsreihe für  $H_{SB} + H_K + H_D$ :

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



- weitere Störungen:  
H-Atom im Magnetfeld  $\downarrow$  Zeeman-Effekt
- und im elektr. Feld  $\downarrow$  Stark-Effekt