15. Die Feinstruktur des Wasserstoff-Spektrums

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

• Hamiltonian:

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

ρ_K … Kernladungsdichte

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

(ii) relativ. Energie:

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

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

• 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 $\mathcal{R} \otimes \mathcal{R}_{1/2}$

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)

[vgl. Kap. 13.4b)]

- Vertauschungsrelationen:

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

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

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

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

$J_z |jm\rangle = m\hbar |jm\rangle \quad , m = -j \ldots j$ (15.5)

- 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:

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

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

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

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

- besser: Wähle

kommutierende Observable

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

(15.7b)

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

$$\boxed{|jm\, ls\rangle = \sum_{m_l=-l}^{l} \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} |lm_l\, sm_s\rangle \underbrace{\langle lm_l\, sm_s | jm\, ls\rangle}_{\text{Clebsch-Gordan-}}}$$

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

- 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	$-\frac{1}{2}$	
$\vdots$		
$-l+1$	$-\frac{1}{2}$	$-(l-\frac{1}{2})$
$-l$	$\frac{1}{2}$	
$-l$	$-\frac{1}{2}$	$-(l+\frac{1}{2})$

j: 2 fach

$\longrightarrow$ alle Zustände $|jmls\rangle$ zu

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

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

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

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

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

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

$$\boxed{\begin{array}{l} H_0 R_{nl}(r) |l m_l s m_s\rangle = E_{nl} R_{nl}(r) |l m_l s m_s\rangle \\ H_0 R_{nl}(r) |jmls\rangle = E_{nl} R_{nl}(r) |jmls\rangle \end{array}} \qquad (15.10)$$

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

- EV zu $L\cdot S$: mit (15.12)

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

- Störungstheorie 1. Ordnung für Energie-EW:

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

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

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

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

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

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

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

$$\boxed{\begin{aligned} &\Delta E_{njl} = \frac{1}{2}\underbrace{|E_n|}_{Ry/n^2}\,\alpha^2\,\frac{1}{n\,l\,(l+\frac{1}{2})(l+1)}\left\{\begin{matrix} l \\ -(l+1)\end{matrix}\right. , \quad l\geq 1 \\ &\Delta E_{nj0} = 0 \quad , \quad l=0 \\ &\text{mit} \quad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137{,}037} \quad \ldots \text{Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante} \end{aligned}}$$

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

15.3 Feinstruktur des H-Atoms

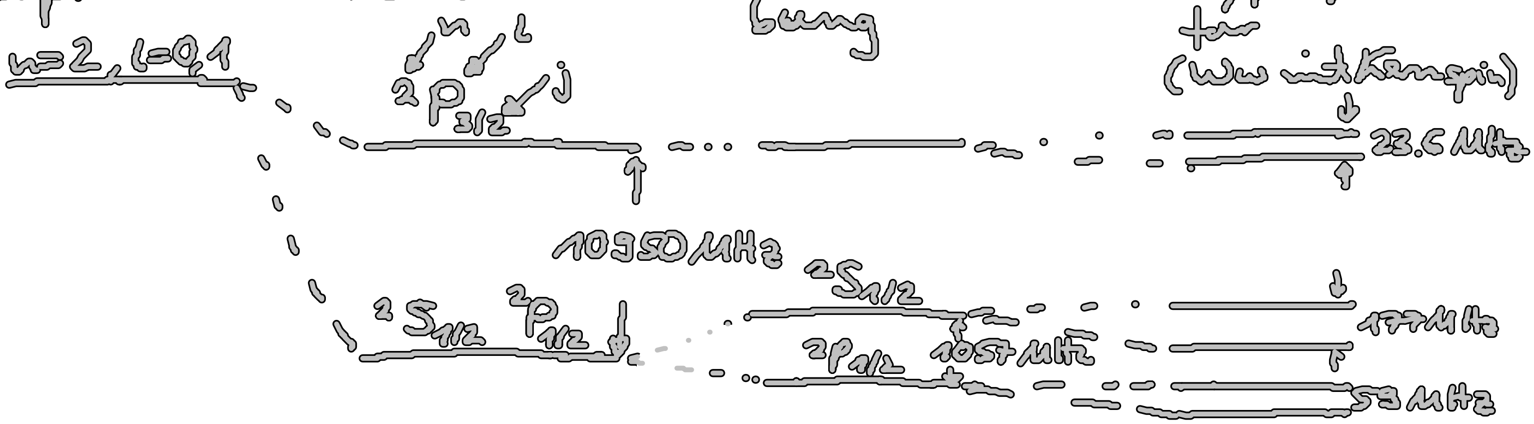
• Störungstheorie für $H_{SB} + H_K + H_0$

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

Bem: (i) Entartung in l für gleiche j

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

• Bsp: Feinstruktur + Lamb-Verschiebung + Hyperfeinstruktur (Ww mit Kernspin)



• weitere Störungen:

H-Atom im Magnetfeld → Zeeman-Effekt

und im elektr. Feld → Stark-Effekt