d) Zusammenfassung der Energiekorrekturen f. 1 Elektronatom

$$\Delta E = \sum_i \Delta E_i \quad (\text{Dispersionskorrektur, Darwinkorrektur, Spin-Bahn WW})$$

$$\Delta E_1 = \underbrace{Ryd}_{\text{Skala}} \underbrace{(Z\alpha)^2}_{\text{Kleine Größe}} \underbrace{\frac{1}{n^4}\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{l+\frac{1}{2}}\right)}_{\text{Quantenzahlabhängigkeit}} \qquad Ryd = \frac{1}{2} m_0 c^2 (Z\alpha)^2$$

$$\Delta E_2 = Ryd\,(Z\alpha)^2 \frac{1}{n^3} \delta_{l,0} \qquad \text{nur s-Zustände}$$

$$\Delta E_3 = \begin{Bmatrix} 0 \\ \frac{1}{2} Ryd\,(Z\alpha)^2 \frac{1}{n^3} \frac{1}{l(l+1)(l+\frac{1}{2})} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l = 0 \\ \cdot\, l \text{ wenn } j = l + \frac{1}{2} \\ \cdot\,(-l-1) \text{ wenn } j = l - \frac{1}{2} \end{Bmatrix}$$

$$\Delta E = \Delta E_{nl} \rightarrow \Delta E_{nj} \quad (\text{wird gezeigt})$$

1. Fall $l = 0$

$$\Delta E_{nl=0} = \Delta E_1 + \Delta E_2 = Ryd\,(Z\alpha)^2 \frac{1}{n^4}\left(\frac{3}{4} \overset{①}{-2n} \overset{②}{+n}\right)$$

$$= Ryd\,(Z\alpha)^2 \frac{1}{n^4}\left(\frac{3}{4} - n\right)$$

2. Fall $l \neq 0$

$$\Delta E_{nl} = \Delta E_1 + \Delta E_3 = Ryd\,(Z\alpha)^2 \frac{1}{n^3}\left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}\begin{Bmatrix} \frac{1}{(l+1)(l+\frac{1}{2})} \\ \frac{-1}{l(l+\frac{1}{2})} \end{Bmatrix}\right)$$

zusammenfassen und oben $l = j - \frac{1}{2}$, unten $l = j + \frac{1}{2}$

$$= Ryd\,(Z\alpha)^2 \frac{1}{n^4}\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j+\frac{1}{2}}\right) \Rightarrow \Delta E_{nj}$$

Vergleich der Formel f. $l=0, l\neq 0$ mit Kenntnis $l=0 \rightarrow j=\frac{1}{2}$

$$\boxed{\Delta E_{nj} = Ryd\,(Z\alpha)^2 \frac{1}{n^4}\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j+\frac{1}{2}}\right)}$$

relativist. Energiekorrektur bei 1 Elektron Atom mit K-Ladungszahl Z

Bemerkg.: Wasserstoff-Diracproblem kann exakt gelöst werden, Entwicklg. d. Energie E_{nj} in Ordnung $(\alpha Z)^2$ gibt exakt das Resultat oben.

5.3. Beispiel H-Atom: relativist. E-Struktur

$\underline{s = \frac{1}{2}}$; $n=1, \underbrace{l=0}_{j=\frac{1}{2}}$; $n=2, \underbrace{l=0,1}_{j=\frac{1}{2},\frac{3}{2}}$ (Schrödinger: E_n) (Dirac: E_{nj})

Grundzustand nach Dirac: $E_{n=1,j=\frac{1}{2}} = -Ryd - \frac{1}{4} Ryd\,\alpha^2$

1. angeregter Zustand nach Dirac $E_{n=2,j=\frac{1}{2}} = -\frac{Ryd}{4} - \frac{5}{2^6} Ryd\,\alpha^2$

$$E_{n=2,j=\frac{3}{2}} = -\frac{Ryd}{4} - \frac{1}{2^6} Ryd\,\alpha^2$$

offensichtlich wir $E_{j=\frac{3}{2}}$ weniger stark abgesenkt als $E_{j=\frac{1}{2}}$

Schrödinger: $n\,l$ **Dirac**: $n\;{}^{2s+1}l_j$

1s:

$$\left|\begin{matrix} n & l & s & m_l & m_s \\ 1 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & \pm\frac{1}{2}\end{matrix}\right\rangle \xrightarrow[j\text{-Zustände}]{} \underline{1\;{}^2S_{1/2}}\;\left|\begin{matrix} n & l & s & j & m_j \\ 1 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \pm\frac{1}{2}\end{matrix}\right\rangle$$

2s:

$$\left|2, 0, \tfrac{1}{2}, 0, \pm\tfrac{1}{2}\right\rangle \longrightarrow \underline{2\;{}^2S_{1/2}}\;\left|2, 0, \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{1}{2}\right\rangle$$

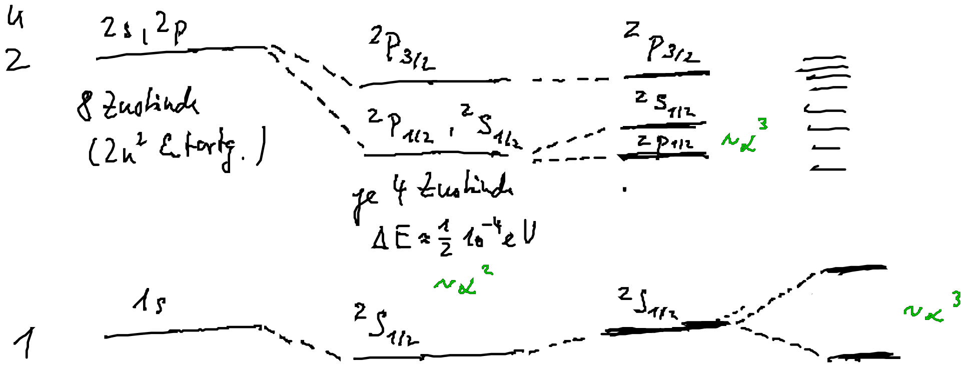
2 Zustände 2 Zustände

2p:

$$\left|2, 1, \tfrac{1}{2}, \begin{matrix}0\\ \pm 1\end{matrix}, \pm\tfrac{1}{2}\right\rangle \longrightarrow \underline{2\;{}^2P_{1/2}}\quad \underline{2\;{}^2P_{3/2}}\;\left|2, 1, \tfrac{1}{2}, \begin{matrix}\frac{1}{2} & \pm\frac{1}{2}\\ \frac{3}{2} & \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}\end{matrix}\right\rangle$$

6 Zustände 6 Zustände

Schrödinger	Dirac / Pauli	WW mit Vakuum
$E_n = -\dfrac{Ryd}{n^2}$	E_{nj}	später



„Grobstruktur" „Feinstruktur" $\underbrace{\text{„Lamb shift"} \quad \text{„Kernspin-}J\text{" WW}}_{\text{„Hyperfeinstruktur"}}$

$E \sim$

relativist. Korrektur führt zur Aufspaltung der j-Zustände
dabei bleiben Zustände mit gleichem l energetisch identisch
Vorher am Wasserstoffatom (Strahlungsfeld quantisiert) heben s-p Entartung auf

Detektion d. relativist. Korrekturen:

Schrödinger

$|2, \overset{0}{1}, \tfrac{1}{2}, \overset{0}{0,\pm1}, \pm\tfrac{1}{2}\rangle$

$|1, 0, \tfrac{1}{2}, 0, \pm\tfrac{1}{2}\rangle$

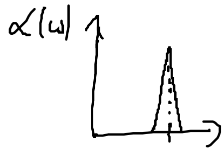
Dirac

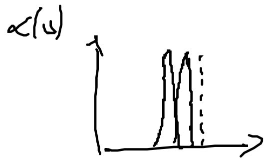
$j=\tfrac{3}{2}$: $|2, 1, \tfrac{1}{2}, \tfrac{3}{2}, \pm\tfrac{1}{2} / \pm\tfrac{3}{2}\rangle$ hell

$j=\tfrac{1}{2}$: $|2, \overset{0}{1}, \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{1}{2}\rangle$ hell + dunkel

$|1, 0, \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{1}{2}\rangle$

Optische Auswahl $\Delta l = \pm 1$





Dublett

5.4. Beispiel H-Atom: Zeeman Effekt mit relativist. Korrekturen

Linie aufspaltg. im Magnetfeld (m_j - Entartg. aufgehoben)

$$\underline{H} = \underbrace{\underline{H_0} + \underline{H_{rel}}}_{H_0^{rel}} + \underbrace{\mu_B \left(\vec{e}\,\hat{l} + 2\hat{\vec{S}} \right) \cdot \vec{B}}$$

H-Atom, relativ. Korrektur, magnetisch Dipol (Bahn + Spin)

$\vec{B} = \vec{e}_z B$ = Konstant

$\hat{\vec{j}} = \hat{\vec{S}} + \vec{e}\,\hat{l}$

Eigenzustände sind bekannt: $|n, l, s, j, m_j\rangle$

$$\mu_B \left(\hat{\vec{j}} + \hat{\vec{S}} \right) \cdot \vec{B}$$

$$\mu_B \left(\underline{\underline{\hat{j}^z}} + \underbrace{\hat{S}^z}_{\text{Störung}} \right) \cdot B$$

Wissen:

$$\underline{H}_0^{rel} |n, l, s, j, m_j\rangle = E_{nj} |n, l, s, j, m_j\rangle$$

$$\hat{j}^z |n, l, s, j, m_j\rangle = \hbar m_j |n, l, s, j, m_j\rangle$$

benötigen in Störungstheorie 1. Ordnung:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \vec{e} = \begin{pmatrix} \vec{e} & 0 \\ 0 & \vec{e} \end{pmatrix}$$

$$\underbrace{\langle n l s j m_j | \hat{S}^z | n l s j m_j \rangle}_{\text{unbekannt, aber in alter Basis bekannt } (m_s, m_l)}$$

$$|n, l, s, \underline{\underline{j, m_j}}\rangle = \alpha_+ |l m_l\rangle \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta_+ |l\, m_l + 1\rangle \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

α_+, β_+ sind Entwicklungskoeffizienten in alter Basis

$+ \hat{=}\ j = l + \frac{1}{2}$

$\alpha_-\ \beta_- \hat{=}\ j = l - \frac{1}{2}$

$$\alpha_+ = \left(\frac{l+m_e+1}{2l+1}\right)^{1/2} \quad , \quad \beta_+ = -\left(\frac{l-m_e}{2l+1}\right)^{1/2}$$

Ergebnisse wie Erwartungswerte, etc. müssen in j, m_j ausgedrückt werden

gesucht: $\langle nlsjm_j | \hat{S}^z | nlsjm_j \rangle$

$$= \underbrace{\langle nl|nl\rangle}_{1} \underbrace{\langle lsjm_j | \hat{S}^z | lsjm_j \rangle}_{1}$$

$$1 \quad \hat{S}^z \left(\alpha_+ \underbrace{|lm_e\rangle}_{Y_{lm_e}(\vartheta,\varphi)} \underbrace{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}}_{\vec{\chi}_{+\frac{1}{2}}} + \beta_+ |l\, m_e+1\rangle \underbrace{\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}}_{\vec{\chi}_{-\frac{1}{2}}} \right)$$

mit $\hat{S}^z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$;

$$= \frac{\hbar}{2}\left(\alpha_+ |lm_e\rangle \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \beta_+ |l m_e+1\rangle \begin{pmatrix}0\\-1\end{pmatrix}\right)$$

multipliziere mit $\frac{\hbar}{2}\left(\alpha_+^* \langle m_e l | (1,0) + \beta_+^* \langle l m_e+1 | (0,1)\right)$

$$\cdot \quad \left(\alpha_+ | l m_e\rangle \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \beta_+ | l m_e+1\rangle \begin{pmatrix}0\\-1\end{pmatrix}\right)$$

mit $\langle m_e l | l m_e+1\rangle = 0$, $\langle m_e l | l m_e\rangle = 1$

$$= \frac{\hbar}{2}\left(|\alpha_+|^2 - |\beta_+|^2\right)$$

„+" $j = l + \frac{1}{2}$

Konzept QZ: $l = j - \frac{1}{2}$, $m_e = m_j - \frac{1}{2}$

$$= \frac{\hbar}{2} \frac{l+m_e+1-l+m_e}{2l+1} = \frac{\hbar}{2}\frac{2m_e+1}{2l+1} = \frac{\hbar m_j}{2l+1}$$

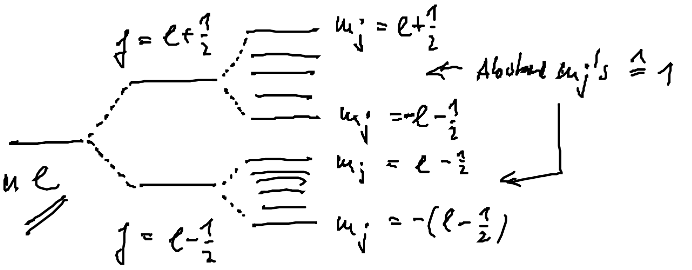
Energieaufspaltung im Magnetfeld!

$j = l + \frac{1}{2}$

$$\Delta E_B = \underbrace{\mu_B B}_{\text{prop. } B} \, m_j \left(1 \pm \frac{1}{2l+1} \right)$$

$\hat{j}^z$

$j = l - \frac{1}{2}$ (ohne Beweis)



schwaches Magnetfeld

Aufspaltung ist von l abhängig, nicht nur von m_j!
(anomaler Zeeman effekt)