

Ferienkurs Experimentalphysik 4
Vorlesung Dienstag
Sommersemester 2012

Andreas Trautner
Florian Lippert

28. August 2012

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|-----|---|----|
| 1 | Das Wasserstoffatom | 2 |
| 1.1 | Lösung der Schrödingergleichung | 2 |
| 1.2 | Quantenzahlen | 3 |
| 1.3 | Aufenthaltswahrscheinlichkeit | 5 |
| 1.4 | Elektronenspin | 6 |
| 2 | Korrekturen zum Energieterm | 7 |
| 2.1 | Relativistische Korrekturen | 7 |
| 2.2 | Feinstruktur / Spin-Bahn-Kopplung | 7 |
| 2.3 | Einschub: Der Gesamtdrehimpuls | 8 |
| 2.4 | Lamb-Shift | 11 |
| 2.5 | Hyperfineinstruktur | 12 |

1 Das Wasserstoffatom

1.1 Lösung der Schrödingergleichung

Das Wasserstoffatom besteht aus einem Proton und einem Elektron und ist damit als einziges neutrales Atom durch die Schrödingergleichung analytisch lösbar. Zur Herleitung der Wellenfunktion $\Psi(\vec{r})$ betrachten wir das System relativ zu seinem Schwerpunkt. Die Schrödingergleichung ergibt sich damit zu:

$$\left[-\frac{\hbar}{2m_e} \nabla_r^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E_r \Psi(\vec{r}) \quad (1)$$

Dabei umkreist quasi das Elektron ein ortsfestes Proton, sodass wir als Potential $V(\vec{r})$ das Coulombpotential annehmen können:

$$V(\vec{r}) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2)$$

Zusätzlich muss der ∇_r^2 -Operator in Kugelkoordinaten transformiert werden:

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (3)$$

Vergleicht man dies mit dem Betragsquadrat des quantenmechanischen Drehimpulsoperator \hat{L}^2 (siehe gestrige Vorlesung)

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (4)$$

so sieht man, dass dieser dem Winkelanteil des ∇_r^2 -Operators in Kugelkoordinaten entspricht. Wir können die Schrödingergleichung also schreiben als

$$\left[-\frac{\hbar}{2m_e} \cdot \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{1}{2m_e r^2} \hat{L}^2 \right] \Psi(\vec{r}) = E_r \Psi(\vec{r}) \quad (5)$$

Hier stehen nun zwei Summanden, der eine nur von \vec{r} abhängig, der andere nur von den Winkeln ϑ und φ . Um dieses Problem zu lösen beschreiben wir die Wellenfunktion $\Psi(r, \vartheta, \varphi)$ als Produkt aus einem Radialanteil $R(r)$ und einem Winkelanteil $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$:

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (6)$$

Der winkelabhängige Anteil $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ wird durch die Kugelflächenfunktionen (siehe gestrige Vorlesung) beschrieben. Diese sind Eigenfunktionen der quantenmechanischen Drehimpulsoperatoren \hat{L}^2 und \hat{L}_z .

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (7)$$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = m_l \hbar Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (8)$$

1.2 Quantenzahlen

Auf die vollständige Herleitung der Radialfunktion wird hier aus Zeitgründen verzichtet. Um sich die Bedeutung der Quantenzahlen klar zu machen, soll hier aber Lösungsskizze gezeigt werden. Nach Anwendung des Drehimpulsoperators und Einsetzen des Separationsansatzes ergibt sich die Schrödingergleichung zu

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \left[\frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0 \quad (9)$$

Wählt man nun den Ansatz $R(r) = u(r) \cdot e^{-\kappa r}$ mit $\kappa = \sqrt{-2m_e E}/\hbar$ folgt daraus

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + 2 \left(\frac{1}{r} - \kappa \right) \frac{du(r)}{dr} + \left[\frac{2c - 2\kappa}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u(r) = 0 \quad (10)$$

mit der Abkürzung $c = \frac{m_e Z e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}$. Wird nun zur Lösung von $u(r)$ ein Potenzreihenansatz $u(r) = \sum_i a_i r^i$ gewählt, kann diese beschrieben werden durch die Rekursionsformel

$$a_i = 2a_{i-1} \frac{\kappa \cdot i - c}{i(i+1) - l(l+1)} \quad (11)$$

Damit $R(r)$ normierbar in $r \rightarrow \infty$ bleibt, darf die Potenzreihe nur endlich viele Glieder haben. Also muss für eine ganze Zahl n der letzte von Null verschiedene Koeffizient a_{n-1} sein, also $a_n = 0$. Ausserdem ergibt sich damit (wegen $0 = 2a_{n-1} \frac{\kappa \cdot n - c}{n(n+1) - l(l+1)}$):

$$c = n \cdot \kappa = n \cdot \frac{\sqrt{-2m_e E}}{\hbar} \quad (12)$$

Die daraus resultierenden Energieeigenwerte

$$E_n = - \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{Z^2}{2\hbar^2 n^2} \quad (13)$$

entsprechen genau den Energien aus dem Bohrschen Atommodell. Schaut man sich die Rekursionsformel bezüglich der Zahlen i und l genauer an, so sieht man, dass der Nenner bei $i = l$ null ist. Folglich müssen alle Koeffizienten mit $i < l$ verschwinden, damit $u(r)$ endlich bleibt. Zusammen mit der Bedingung, dass b_{n-1} der letzte von Null verschiedene Koeffizient sein muss (also $i < n$), folgt daraus die bekannte Bedingung für die Drehimpulsquantenzahl

$$l \leq n - 1 \quad (14)$$

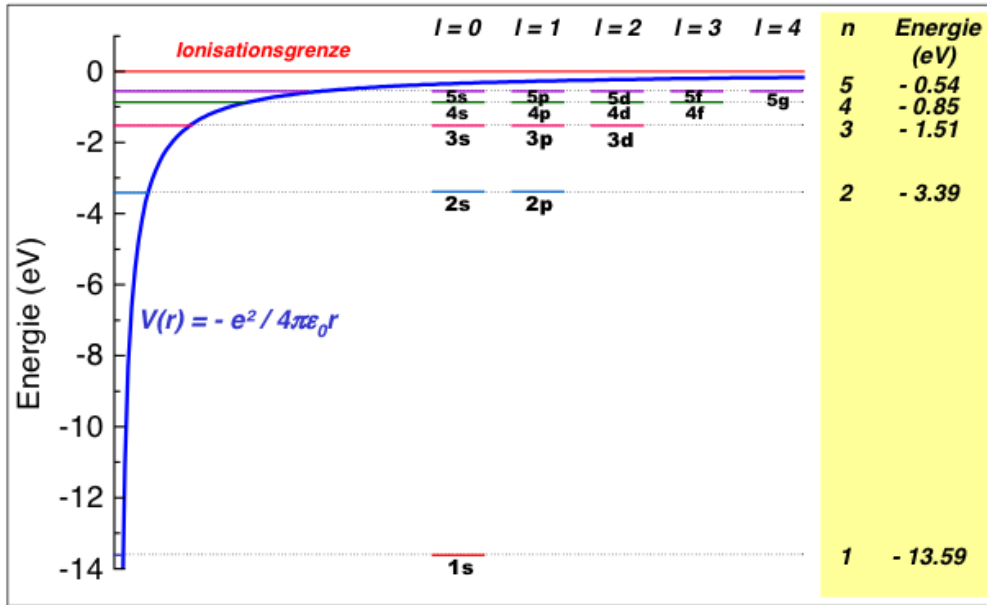


Abbildung 1: Termschema des Wasserstoffatoms (aus [Gross], Seite 120)

Die Kugelflächenfunktion $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ ist definiert durch

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_{lm}(\cos\vartheta) e^{im\varphi} \quad (15)$$

wobei P_{lm} die zugeordneten Legendrepolynome sind:

$$P_{lm}(x) = (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{|m|} P_l(x) \quad (16)$$

Weil $P_l(x)$ eine Potenzreihe bis zur Potenz x^l ist, muss $|m| \leq l$ sein. Für die Hauptquantenzahl n , Bahndrehimpulsquantenzahl l und die magnetische Quantenzahl m gelten dann also folgende Zusammenhänge:

$$l \leq n - 1 \quad (17)$$

$$-l \leq m \leq l \quad (18)$$

Die Formel für die Energieeigenwerte E_n hängt nur von n ab. Wie wir aber gesehen haben, gibt es aufgrund der magnetischen Quantenzahl m zu jedem n noch $2l+1$ Zustände, die aber alle die gleiche Energie E_n haben. Man spricht dabei auch von Entartung, der Entartungsgrad ist definiert durch

$$k = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (19)$$

1.3 Aufenthaltswahrscheinlichkeit

Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron in einem bestimmten Abstand zwischen r und $r+dr$ vom Kern zu finden, beträgt

$$W(r)dr = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\Psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi)|^2 r^2 dr \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = r^2 R_{n,l}^2(r) dr \quad (20)$$

Die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ sind so normiert, dass das Integral über den gesamten Raum immer 1 ergibt. Für den 1s-Zustand lässt sich das Maximum der radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit zu $W(r) = a_B$ bestimmen. Die eigentlich dem Bohrradius entsprechende quantenmechanische Messgröße, der Erwartungswert von r , stimmt nicht mit dem Bohrschen Radius überein:

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty dr \cdot r |\Psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi)|^2 = \int_0^\infty \frac{r}{\pi a_B^3} 4\pi r^2 e^{-2r/a_B} dr = \frac{3}{2} a_B \quad (21)$$

Dies ist der Ortsunschärfe der Quantenteilchen geschuldet.

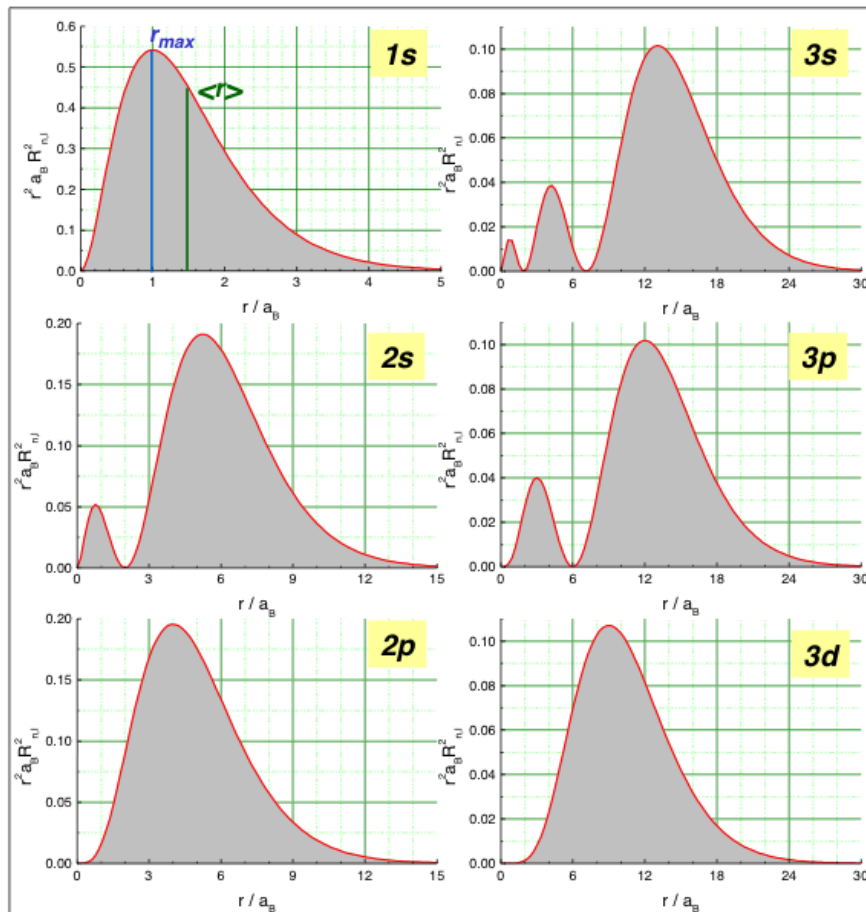


Abbildung 2: Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeiten des Elektrons ([Gross], Seite 123)

1.4 Elektronenspin

Elektronen auf einer Kreisbahn erzeugen ein magnetisches Dipolmoment

$$\hat{\mu}_l = -\frac{e}{2m_e}\hat{L} \quad (22)$$

Deren Eigenwerte sind mit den Drehimpulseeigenwerten einfach zu bestimmen: (mit $\mu_B = e\hbar/2m_e$ das Bohrsche Magneton und $g_l = 1$ der Lande-Faktor des Bahndrehimpulses)

$$\hat{\mu}_l^2\Psi = \left(\frac{-e}{2m_e}\right)^2 \hat{L}^2\hbar^2\Psi = \left(\frac{-e}{2m_e}\right)^2 l(l+1)\hbar^2\Psi = g_l^2 \cdot \mu_B^2 l(l+1)\Psi \quad (23)$$

$$\hat{\mu}_{l,z}\Psi = \left(\frac{-e}{2m_e}\right) L_z\Psi = \left(\frac{-e}{2m_e}\right) m\hbar\Psi = -g_l \cdot \mu_B \cdot m\Psi \quad (24)$$

1922 ließen Otto Stern und Walther Gerlach in einem Versuch Silberatome (Valenzelektronen im 5s-Zustand, deshalb kein Bahndrehimpuls, also $l = 0$) durch ein zum Strahl quer stehendes inhomogenes Magnetfeld fliegen. Dabei spaltete der Strahl in zwei getrennte Strahlen auf. Samuel A. Goudsmit und George E. Uhlenbeck stellten 1925 die Hypothese auf, dass Elektronen einen Eigendrehimpuls besitzen, den man Elektronenspin nennt. Dieser wird durch die Spinquantenzahl $s = 1/2$ beschrieben. Analog zum Bahndrehimpuls wird definiert

$$|\hat{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \sqrt{3/4}\hbar \quad (25)$$

$$\hat{S}_z = m_s\hbar = \pm\frac{\hbar}{2} \quad (26)$$

Zusätzlich kann nun analog zum Bahndrehimpuls ein magnetisches Moment, das Spinmoment μ_s definiert werden

$$\hat{\mu}_s = -g_s\frac{e}{2m_e}\hat{S} = -g_s\mu_B\frac{\hat{S}}{\hbar} \quad (27)$$

wobei g_s der Spin-g-Faktor oder gyromagnetische Faktor des Elektrons ist. Dieser bedarf wegen der Wechselwirkung zwischen dem Strahlungsfeld und dem Elektron einer Korrektur und ist:

$$g_s = 2\left(1 + \frac{\alpha}{\pi}\right) = 2.0022908 \quad (28)$$

2 Korrekturen zum Energieterm

2.1 Relativistische Korrekturen

Aufgrund der Bewegung des Elektrons um den Kern erfährt dieses eine relativistische Massenzunahme. Um diese zu bestimmen, muss der relativistische Energieansatz verwendet werden.

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2 + E_{pot} = m_0 c^2 \sqrt{1 + \frac{p^2}{m_0^2 c^2}} - m_0 c^2 + E_{pot} \quad (29)$$

Entwickelt man die Wurzel, so kann die Formel umgeschrieben werden als

$$E = \left(\frac{p^2}{2m_0} + E_{pot} \right) - \frac{p^4}{8m_0^3 c^2} + \dots = E_{nrel} - \Delta E_{rel} \quad (30)$$

Die höheren Glieder der Reihenentwicklung kann in diesem Fall wegen $E_{kin} \ll m_0 c^2$ vernachlässigt werden. $\Delta \hat{H}_{rel} = -\frac{\hat{p}^4}{8m_0^3 c^2}$ ist dann die relativistische Korrektur des Hamilton-Operators. Sein Erwartungswert ist:

$$\Delta E_{rel} = \langle \Delta \hat{H}_{rel} \rangle = \frac{\hbar^4}{8m_0^3 c^2} \int \Psi_{n,l,m}^* \nabla^4 \Psi_{n,l,m} dV \quad (31)$$

Zusammen mit der Wellenfunktion des Wasserstoffatoms erhalten wir nun den relativistischen Korrekturterm, auch Darwin-Term genannt:

$$\Delta E_{rel} = E_n \left[\frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{l}{l+1/2} \right) + O(\alpha^3) \right] \quad (32)$$

$\alpha \approx 137^{-1}$ ist die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante. Die Gesamtenergie des Zustandes ist nun:

$$E_{n,l} = E_n \left[1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{l}{l+1/2} \right) + O(\alpha^3) \right] \quad (33)$$

2.2 Feinstruktur / Spin-Bahn-Kopplung

Neben der relativistischen Korrektur, welche die Entartung von Zuständen gleichen n aber unterschiedlichen l aufhob, gibt es eine weitere Korrektur, die auf den Spin des Elektrons zurückzuführen ist. Nachdem die vollständige quantenmechanische Betrachtung zu umfangreich wäre, wollen wir den Effekt hier mit einem semiklassischen Modell erklären. Betrachtet man das Ruhesystem des Elektrons so erzeugt der um das Elektron kreisende Kern ein Magnetfeld, welches nach Biot-Savart berechnet werden kann:

$$\vec{B}_l = \frac{\mu_0 Z e}{4\pi r^3} (\vec{v} \times (-\vec{r})) = \frac{\mu_0 Z e}{4\pi r^3 m_e} \vec{L} \quad (34)$$

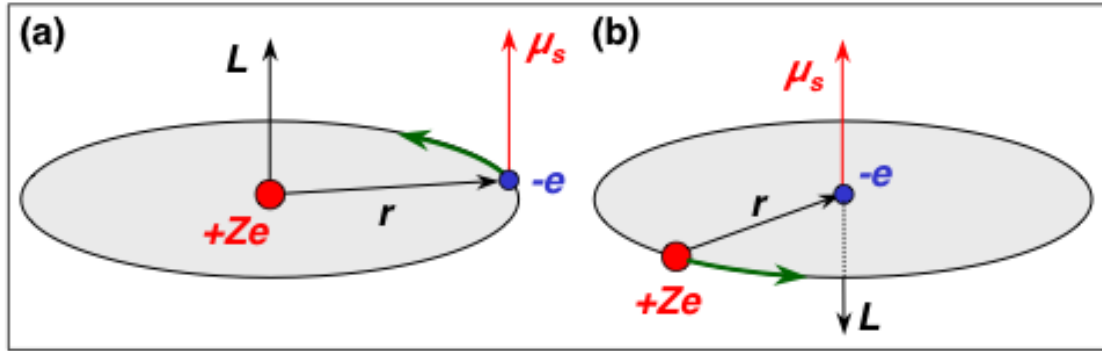


Abbildung 3: Semiklassisches Modell zur Spin-Bahn-Kopplung (a) Ruhesystem des Kerns und (b) des Elektrons ([Gross], Seite 141)

Dabei wurde verwendet, dass der Drehimpuls $\vec{L} = m_e \vec{r} \times v$ ist. In diesem Magnetfeld erfährt nun der Spin eine Zusatzenergie

$$\Delta E_{LS} = -\mu_s \cdot \vec{B}_l = \frac{g_s \mu_B}{\hbar} (\vec{S} \cdot \vec{B}_l) \quad (35)$$

Setzt man nun \vec{B}_l ein ergibt sich damit für die Korrektur des Hamiltonoperators

$$\Delta \hat{H}_{LS} = g_s \mu_B \frac{\mu_0 Z e}{4\pi r^3 m_e \hbar} (\hat{S} \cdot \hat{L}) \approx \frac{\mu_0 Z e^2}{4\pi r^3 m_e^2} (\hat{S} \cdot \hat{L}) \quad (36)$$

und für den Energieeigenwert der Korrektur

$$\Delta E_{LS} = \langle \Delta \hat{H}_{LS} \rangle \approx \frac{\mu_0 Z e^2}{4\pi r^3 m_e^2} \langle \hat{S} \cdot \hat{L} \rangle \quad (37)$$

Beispiel: Für einen Bahnradius von 0.1nm und $Z = 1$ (Wasserstoff) erhält man Magnetfelder $B_l \sim 1\text{T}$ was zu einer Aufspaltung von 100meV führt.

2.3 Einschub: Der Gesamtdrehimpuls

Aufgrund des zusätzlichen Kopplungsterms ($\hat{L} \cdot \hat{S}$) im Hamiltonoperator kommutiert dieser nun nicht mehr mit dem Bahndrehimpulsoperator \hat{L}_z :

$$[\hat{L}_z, \hat{H}] \sim [\hat{L}_z, (\hat{L} \cdot \hat{S})] = [\hat{L}_z, (\hat{L}_x \cdot \hat{S}_x + \hat{L}_y \cdot \hat{S}_y + \hat{L}_z \cdot \hat{S}_z)] = i\hbar [(\hat{L}_y \cdot \hat{S}_x + \hat{L}_x \cdot \hat{S}_y)] \neq 0 \quad (38)$$

Damit sind m und m_s keine guten Quantenzahlen und L_z und S_z keine Eigenfunktionen des Hamiltonoperators mehr. Nachdem der Spin an den Bahndrehimpuls koppelt können wir beide zu einem Gesamtdrehimpuls \vec{J} zusammenfassen:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (39)$$

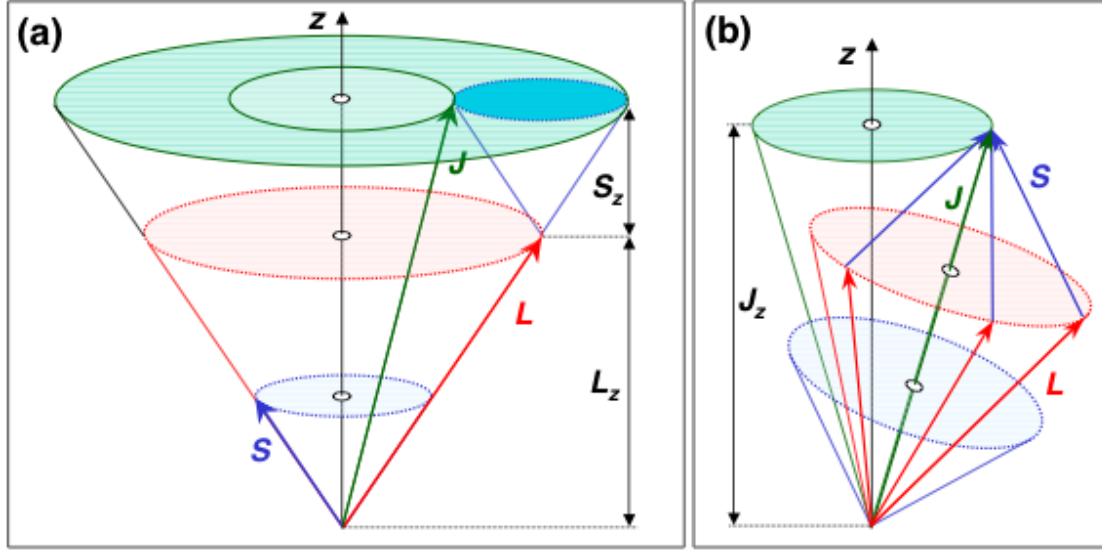


Abbildung 4: Vektormodell zur Kopplung von L und S zu J : (a) sind n, l, s, m_s gute Quantenzahlen, sowohl L als auch S präzidieren um die z -Achse. (b) L und S präzidieren um J , damit sind die Projektion von L und S nicht Fest auf die z -Achse, aber die Projektion von J . Damit sind m und m_s keine guten Quantenzahlen mehr, aber m_j ([Gross], Seite 143)

Dabei gelten für \vec{J} wie für alle Drehimpulse die bekannten Beziehungen:

$$|\vec{J}| = \sqrt{j(j+1)}\hbar \quad (40)$$

$$\hat{J}_z = m_j \hbar \quad (41)$$

mit den neuen Quantenzahlen $-j \leq m_j \leq j$. Damit sind jetzt nicht mehr n, l, m, m_s sondern n, j, m_j, l, s die neuen guten Quantenzahlen, die zur Charakterisierung der Energiezustände des Elektrons im Wasserstoffatom bei Spin-Bahn-Kopplung verwendet werden. Das neue Termschema zur Beschreibung ist

$$nL_j \quad (42)$$

wobei L durch die Buchstaben s, p, d, f, \dots für $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ verwendet werden. Das Elektron im Zustand $n = 2, l = 1, s = 1/2$ heißt also $2p_{3/2}$.

Quadriert man die Gleichung $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, so folgt daraus

$$\langle \vec{S} \cdot \vec{L} \rangle = \frac{1}{2} \langle [\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2] \rangle = \frac{1}{2} \hbar [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \quad (43)$$

Fasst man dies nun in einer Gleichung für den Energieeigenwert eines Elektrons im Wasserstoffatoms zusammen, so erhält man

$$E_{n,l,j} = E_n + \Delta E_{LS} = E_n + \frac{\lambda_{LS}}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \quad (44)$$

mit der Spin-Bahn-Kopplungskonstante

$$\lambda_{LS} = \frac{\mu_0 Z e^2 \hbar^2}{8\pi m_e^2 r^3} \quad (45)$$

Die eckige Klammer hat zum Beispiel für $l = 1$ für $m_s = +1/2$ den Wert $+1$, für $l = 1$ für $m_s = -1/2$ den Wert -2 . Damit spaltet der $2p_{3/2}$ Zustand um $\lambda_{LS}/2$ nach oben, der $2p_{1/2}$ Zustand um $-\lambda_{LS}$ nach unten auf.

Um nun eine Abschätzung der Energieeigenwerte machen zu können, muss der quantenmechanische Erwartungswert der Spin-Bahn-Kopplungskonstante λ_{LS} ausgerechnet werden, da dieser von r^{-3} abhängt und r unscharf ist.

$$\langle \lambda_{LS} \rangle = \frac{\mu_0 Z e^2 \hbar^2}{8\pi m_e^2} \int \Psi_{n,l,m}^* \frac{1}{r^3} \Psi_{n,l,m} dV = -E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{n \cdot l(l + \frac{1}{2})(l + 1)} \quad (46)$$

Nachdem der Abstand zwischen zwei Energieniveaus $(l + 1/2)$ ist, folgt daraus

$$\Delta E_{LS} = \langle \lambda_{LS} \rangle \left(l + \frac{1}{2} \right) = -E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{n \cdot l(l + 1)} \quad (47)$$

Berücksichtigt man nun neben der Spin-Bahn-Kopplung auch die relativistische Korrektur (siehe oben), so ergibt sich für die Energie des Zustandes (n, l, j) :

$$E_{n,j} = E_n \left[1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{j}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (48)$$

Man sieht, dass die Energie eines Elektronenzustandes nicht von der Bahndrehimpulsquantenzahl l abhängt, also noch immer entartet sind.

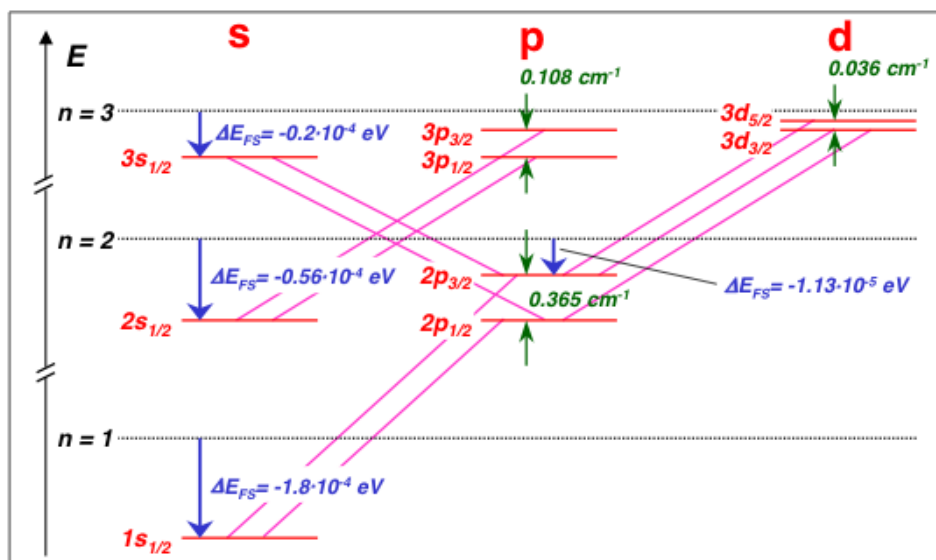


Abbildung 5: Termschema des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung der relativistischen Korrektur und der Spin-Bahn-Kopplung ([Gross], Seite 146)

2.4 Lamb-Shift

Hochauflösende Spektroskopiemethoden haben gezeigt, dass die Zustände mit gleichem j nicht notwendigerweise entartet sein müssen. Dies kann durch effekte der Quantenelektrodynamik erklärt werden. Innerhalb eines kurzen Zeitintervall, welches durch die Heisenbergschen Energieunschärfe gegeben ist

$$\Delta t \leq \frac{\hbar}{\Delta E} = \frac{1}{\omega} \quad (49)$$

kann ein virtuelles Photon emittiert und auch wieder absorbiert werden, ohne dass die Energieerhaltung verletzt wird. Die Rückstöße der Emission und Absorption führen dazu, dass die Elektronen nicht auf perfekten Bahnen um den Atomkern kreisen, sondern eine Art Zitterbewegung ausführen. Dadurch vergrößert sich der Bahnradius, was sich im Coulomb-Energierterm bemerkbar macht:

$$\langle E \rangle = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{r + \delta r} \right\rangle \quad (50)$$

Somit wechselwirkt das Elektron, abhängig vom Bahndrehimpuls l , unterschiedlich stark mit dem Strahlungsfeld, sodass eine Energieaufspaltung beobachtet werden kann.

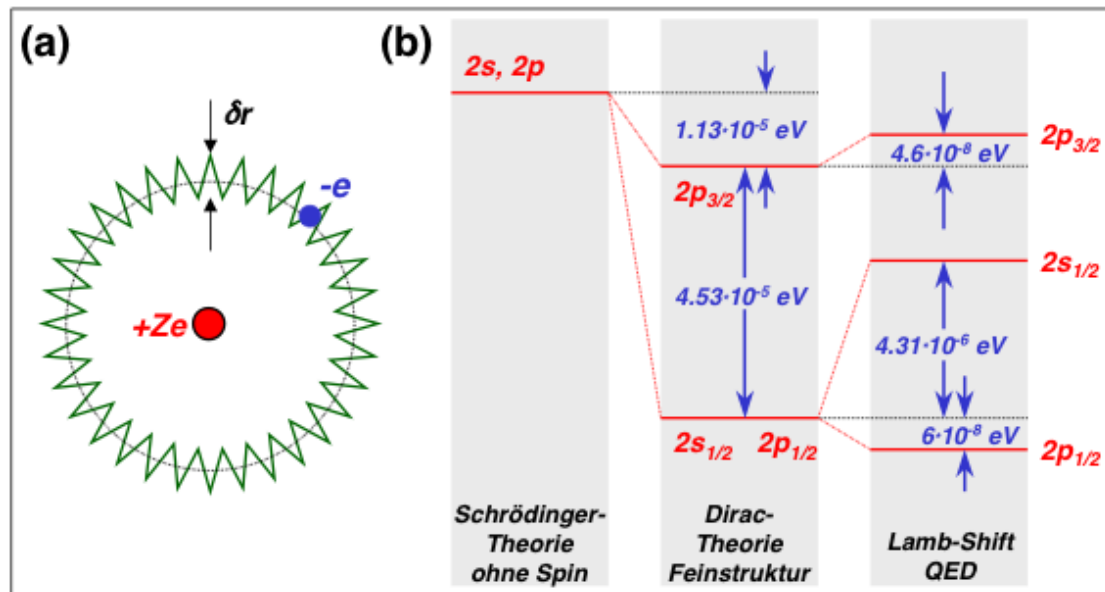


Abbildung 6: (a) Zitterbewegung des Elektrons (b) Feinstruktur und Lamb-Shift bei $n = 2$ ([Gross], Seite 150)

2.5 Hyperfeinstruktur

Atomkerne besitzen einen Drehimpuls, der Kernspin I genannt wird. Genauso wie für den Bahndrehimpuls und Spin gilt für den Kernspin die gleichen Quantenregeln

$$|\vec{I}| = \sqrt{i(i+1)}\hbar \quad (51)$$

$$\hat{I}_z = m_i\hbar \quad (52)$$

mit den neuen Quantenzahlen $-i \leq m_i \leq i$. Im Wasserstoffatom gilt (nur ein Proton!) $i = 1/2$ und damit $|\vec{I}| = \sqrt{3/4}\hbar$ und $m_i = \pm 1/2$. Nachdem der Kern auch geladen ist, erzeugt er ein magnetisches Moment

$$\vec{\mu}_i = g_i\mu_K \frac{\vec{I}}{\hbar} \quad (53)$$

$$\mu_{i,z} = g_i\mu_K m_i \quad (54)$$

wobei g_i der Kern-g-Faktor und μ_K das Kernmagneton, analog zum bohrschen Magneton ist. In diesem Fall (nur ein Proton!) gilt $\mu_K = \frac{e\hbar}{2m_P} = \mu_B \frac{m_e}{m_P} \approx \mu_B \frac{1}{1836}$ sowie $g_P = 5.585694722(126)$.

Durch das am Ort des Kerns vom Elektron mit dem Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ erzeugte Magnetfeld besitzt das Kernmoment μ_i eine Zusatzenergie, die sogenannte Hyperfeinstruktur

$$\Delta E_{HFS} = -\vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_j = -|\vec{\mu}_i| |\vec{B}_j| \cos(\angle(\vec{J}, \vec{I})) \quad (55)$$

Dabei kann der Cosinus durch die Definition eines neuen Gesamtdrehimpulses $\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}$, für den wieder die gleichen Regeln wie für den Gesamtdrehimpuls \vec{J} (siehe oben) gelten, beschrieben werden als

$$\cos(\angle(\vec{J}, \vec{I})) = \frac{\vec{J} \cdot \vec{I}}{|\vec{J}| |\vec{I}|} = \frac{1}{2} \frac{f(f+1) - j(j+1) - i(i+1)}{\sqrt{j(j+1)} \sqrt{i(i+1)}} \quad (56)$$

Wieder analog ergibt sich nun die Hyperfeinenergie des Wasserstoffatoms zu

$$E_{HFS} = E_{n,l,j} + \Delta E_{LS} = E_{n,l,j} + \frac{\lambda_{JI}}{2} [f(f+1) - j(j+1) - i(i+1)] \quad (57)$$

mit der Hyperfeinstrukturkonstante $\lambda_{JI} = \frac{g_i\mu_K B_j}{\sqrt{j(j+1)}}$

Für das Wasserstoffatom mit $i = 1/2$ und damit $j = 1/2$ kann $f = 0$ oder $f = 1$ sein. Das führt zu einer Aufspaltung von

$$E_{HFS}(f=1) = E_{1,0,1/2} + \frac{\lambda_{IJ}}{4} \quad (58)$$

$$E_{HFS}(f=0) = E_{1,0,1/2} - \frac{3\lambda_{IJ}}{4} \quad (59)$$

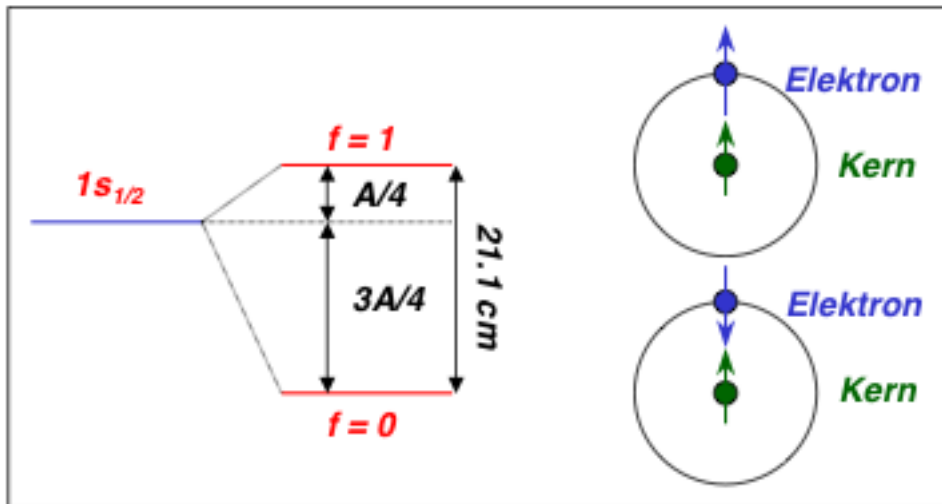


Abbildung 7: Hyperfeinstruktur des Wasserstoff im Grundzustand ([Gross], Seite 157)

Quellen:

[Gross]: Vorlesungsskript Physik 4 zum Sommersemester 2003 von Prof. Dr. Rudolf Gross, Walther-Meissner-Institut; Online verfügbar unter http://www.wmi.badw.de/teaching/Lecturenotes/Physik4/Physik4_Gesamt_2002.pdf