

## 2.14 Fein- und Hyperfeinstruktur

### a) Feinstruktur

Zwei Effekte: relativistische Korrekturen und Spin-Bahnkopplung

#### Relativistische Korrekturen

Kinetische Energie

$$E_{kin} = \frac{p^2}{2m_e} \quad \rightarrow \quad E_{kin} = \sqrt{m_e^2 \cdot c^4 + p^2 \cdot c^2} - m_e \cdot c^2$$

Wurzel entwickeln: erster Term ist die nichtrelativistische Energie, zweiter Term proportional zu  $p^4$  ist die relativistische Korrektur in niedrigster Ordnung (die hier ausreicht). Die Energieabweichung ergibt sich aus der Anwendung der vierten Potenz des Impulsoperators auf die Wellenfunktion  $\propto \nabla^4 \psi_{nlm}$

Das Ergebnis hängt von den Quantenzahlen  $n$  und  $l$  ab, hebt also die Entartung der Drehimpulszustände auf:

$$\Delta E_{nl}^{rel.} = E_n \cdot \frac{Z^2 \cdot \alpha^2}{n} \left( \frac{3}{4n} - \frac{1}{l+1/2} \right)$$

**Darwin-Term**

Da  $E_{nl} \sim \alpha^2$  ist, ist die relativistische Korrektur in der Größenordnung von  $\alpha^4$ .



Charles G. Darwin  
(1887 - 1962)

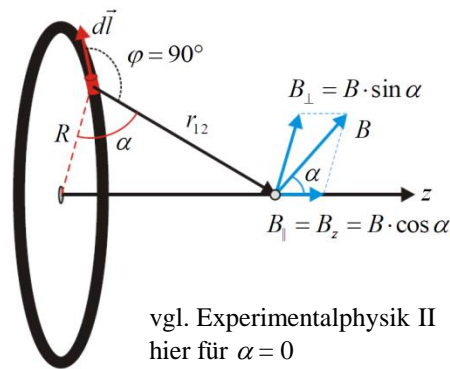
### Spin-Bahn-Kopplung

Betrachte im Ruhesystem des Elektrons das Magnetfeld aufgrund des Atomkerns (der aus der Sicht des Elektrons einen Kreisstrom erzeugt):

$$B = \frac{\mu_0 \cdot I}{2r} \quad \text{mit} \quad I = Z \cdot e \frac{v}{2\pi \cdot r} \quad \text{und} \quad v = \frac{|\vec{l}|}{m_e \cdot r}$$

$$B = \frac{\mu_0 \cdot Z \cdot e \cdot |\vec{l}|}{2r \cdot 2\pi \cdot r \cdot m_e \cdot r} \quad \mu_0 \cdot \epsilon_0 = 1/c^2$$

$$\vec{B} = \frac{1}{4\pi \cdot \epsilon_0} \frac{Z \cdot e}{m_e \cdot c^2 \cdot r^3} \cdot \vec{l}$$



vgl. Experimentalphysik II hier für  $\alpha = 0$

Hier steht die Elektronen- und nicht die Kernmasse, da es immer noch der Drehimpuls des Elektrons ist.

Die Energiedifferenz zwischen den beiden Spin-Einstellungen ( $\pm \hbar/2$ ) relativ zum Magnetfeld ist

$$\Delta E = \vec{\mu}_s \cdot \vec{B} = g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \vec{s} \cdot \frac{1}{4\pi \cdot \epsilon_0} \frac{Z \cdot e}{m_e \cdot c^2 \cdot r^3} \cdot \vec{l} \approx \frac{Z \cdot e^2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot m_e^2 \cdot c^2 \cdot r^3} \cdot \vec{s} \cdot \vec{l} \quad \text{mit} \quad \mu_B = \frac{e \cdot \hbar}{2m_e}; \quad g_s \approx 2$$

Diese Betrachtung leidet darunter, dass das Ruhesystem des Elektrons kein Inertialsystem ist, aber das kann bei der Transformation in das Ruhesystem des Kerns durch einen weiteren **Faktor 1/2** in Ordnung gebracht werden (der sogenannte **Thomas-Faktor**, benannt nach Llewellyn Thomas, 1903-1992). Anmerkung: Man könnte auch direkt im Ruhesystems des Kerns die Wechselwirkung der elektrischen Dipolmomente von Kern und Elektronenbahn (ein bewegter magnetischer Dipol erzeugt einen elektrischen Dipol) betrachten, aber das wäre noch komplizierter. Mit dem Thomas-Faktor gilt

$$E_{nls} = E_n + \frac{Z \cdot e^2}{8\pi \cdot \epsilon_0 \cdot m_e^2 \cdot c^2 \cdot r^3} \cdot \vec{s} \cdot \vec{l}$$

wobei für  $1/r^3$  und  $(s \cdot l)$  die entsprechenden Erwartungswerte eingesetzt werden müssen, die nicht ganz offensichtlich sind. Da  $s$  und  $l$  bei Anwesenheit der Spin-Bahn-Kopplung keine "guten" Quantenzahlen mehr sind, wird der Gesamtdrehimpuls  $j$  mit den üblichen Eigenschaften für Drehimpulse eingeführt:

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s} \quad |\vec{j}| = \sqrt{j \cdot (j+1)} \cdot \hbar \quad \vec{j}^2 = \vec{l}^2 + 2 \cdot \vec{s} \cdot \vec{l} + \vec{s}^2 \quad \rightarrow \quad \vec{s} \cdot \vec{l} = \frac{1}{2} (\vec{j}^2 - \vec{l}^2 - \vec{s}^2)$$

**Erwartungswerte**  $\langle \vec{s} \cdot \vec{l} \rangle = \frac{\hbar}{2} \left( j \cdot (j+1) - l \cdot (l+1) - \underbrace{3/4}_{s \cdot (s+1)} \right)$

die Quadrate von j, l und s sind weiterhin "gute" Quantenzahlen

$$\langle 1/r^3 \rangle = \left( \underbrace{\frac{m_e \cdot e^2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot \hbar^2}}_{1/a_0} \cdot \frac{Z}{n} \right)^3 \frac{1}{l \cdot (l+1/2) \cdot (l+1)}$$

$a_0$  ist der Bohrsche Radius

**eingesetzt**  $E_{nls} = E_n - E_n \cdot \frac{Z^2 \alpha^2}{2n} \cdot \frac{j \cdot (j+1) - l \cdot (l+1) - 3/4}{l \cdot (l+1/2) \cdot (l+1)}$

hier wurde der Vorfaktor durch die Verwendung der Feinstrukturkonstante  $\alpha$  sowie der Energie  $E_n$  (daher auch das Minuszeichen) vereinfacht

**Die Quantenzahl für den Gesamtdrehimpuls kann zwei Werte annehmen:**

$$j = l + 1/2 \quad \text{oder} \quad j = l - 1/2$$

**Wenn man den Darwin-Term addiert, ergibt sich nach einigen Umformungen (prima Übungsaufgabe):**

$$E_{nls} = E_n \cdot \left\{ 1 - \frac{Z^2 \cdot \alpha^2}{n} \left( \frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right\}$$

**Dieses überraschend einfache Ergebnis deutet darauf hin, dass beide Terme irgendwie "verwandt" sind. In der Tat ist nicht nur der Darwin-Term, sondern auch die Spin-Bahn-Kopplung ein relativistischer Effekt (Magnetismus kann ja als relativistischer Effekt bewegter Ladungen gedeutet werden). Allerdings ist diese Formel nur eine (gute) Näherung im Rahmen der "Störungstheorie".**

**Bemerkenswert ist auch, dass die Energie der Zustände nicht vom Bahndrehimpuls  $l$  und/oder vom Spin  $s$ , sondern nur vom Gesamtdrehimpuls  $j$  abhängt. Weitere kleine Effekte (Lamb-Shift und Hyperfeinstruktur) heben diese Entartung auf.**

## b) Die Lamb-Verschiebung (Lamb-Shift)

Die Elektronen im Atom werden von "Vakuumschwankungen" beeinflusst, d.h. Teilchen-Antiteilchen-Paare, die nach der Quantenfeldtheorie ständig für kurze Zeit entstehen. Dies bewirkt eine kleine Verschiebung der Energieniveaus, die durch eine Korrektur des Coulomb-Potentials beschrieben wird. Die Lamb-Verschiebung ist

$$\Delta E_{Lamb} = \alpha^5 \cdot m_e \cdot c^2 \cdot f(n, l, j)$$

wobei  $\alpha$  wieder die Feinstruktur-Konstante und  $f$  eine Funktion von  $n$ ,  $l$  und (für  $l > 0$ ) von  $j$  in der Größenordnung von  $10^{-2}$  ist.

Wie misst man so kleine Verschiebungen, die im Bereich von  $10^{-6}$  eV liegen? Die Übergänge zwischen den Zuständen  $2s_{1/2}$  und  $2p_{1/2}$ , die gemäß der Feinstruktur entartet sein sollten, erfordern Photonen mit Frequenzen im GHz-Bereich (Mikrowellen). Im Experiment von Lamb 1947 wurden H-Atome aus einem Ofen durch Stöße mit Elektronen in den langlebigen  $2s_{1/2}$ -Zustand angeregt (Lebensdauer  $\sim 1$  s). Beim Auftreffen auf ein Wolframblech bewirkten diese Atome einen Strom, nicht aber wenn sie vorher mit abstimmbaren Mikrowellen in den kurzlebigen  $2p_{1/2}$ -Zustand überführt wurden, da sie vor dem Auftreffen auf das Blech in den Grundzustand gelangt waren. Aus der Mikrowellenfrequenz  $\nu$ , die das Stromsignal minimiert, ergibt sich die Energiedifferenz zwischen den Zuständen gemäß  $E = h \cdot \nu$ .

Anmerkung: Bezeichnung atomarer Zustände:

$n$  Drehimpuls  $j$  z.B.  $2s_{1/2}$



Willis E. Lamb Jr.  
(1913 - 2008)

## b) Die Hyperfeinstruktur

Atomkerne sind ausgedehnte Objekte und können auch einen **Drehimpuls  $I$**  haben, dessen Einfluss bisher nicht berücksichtigt wurde. Mit den üblichen Eigenschaften:

$$|\vec{I}| = \sqrt{I \cdot (I + 1)} \cdot \hbar \quad \text{mit} \quad I_z = m_I \cdot \hbar \quad \text{wobei} \quad -I \leq m_I \leq I$$

Als handliche Einheit für das nukleare magnetische Moment wird das **Kernmagneton** definiert, das sich vom Bohrschen Magneton nur durch die Protonen- statt Elektronenmasse unterscheidet (Index  $N$  für Nucleus):

$$\mu_N = \frac{e \cdot \hbar}{2m_p} = 5,05 \cdot 10^{-27} \frac{\text{J}}{\text{T}}$$

Natürlich kann man die Magnetons auch in eV/T ausdrücken (Energie pro Magnetfeld):

$$\mu_N = 3,15 \cdot 10^{-8} \frac{\text{eV}}{\text{T}} \quad \text{und} \quad \mu_B = 5,79 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{T}}$$

Das magnetische Moment eines Kerns mit Drehimpuls  $I$  und dem entsprechenden gyromagnetischen Verhältnis ist

$$\vec{\mu}_I = \gamma_I \cdot \vec{I} = g_I \cdot \frac{\mu_N}{\hbar} \cdot \vec{I} \quad \text{z.B. für ein Proton} \quad |\vec{\mu}_p| = 2,79 \cdot \mu_N$$

Im Magnetfeld, das von einem Elektron mit Gesamtdrehimpuls  $j$  am Ort des Kerns erzeugt wird, ergibt sich für das magnetische Moment des Kerns eine potentielle Energie, die von der relativen Orientierung abhängt:

$$E_{I,j} = -\vec{\mu}_I \cdot \vec{B}_j \quad \text{Der Winkel zwischen den beiden Vektoren ist} \quad \frac{\vec{\mu}_I \cdot \vec{B}_j}{|\vec{\mu}_I| \cdot |\vec{B}_j|} = \frac{\vec{I} \cdot \vec{j}}{|\vec{I}| \cdot |\vec{j}|}$$

Mit dem **Gesamtdrehimpuls  $F$  von Elektron und Kern**

$$\vec{F} = \vec{j} + \vec{I}; \quad \vec{I} \cdot \vec{j} = \frac{1}{2} (\vec{F}^2 - \vec{j}^2 - \vec{I}^2) \quad \rightarrow \quad \frac{\vec{I} \cdot \vec{j}}{|\vec{I}| \cdot |\vec{j}|} = \frac{1}{2} \frac{F \cdot (F + 1) - j \cdot (j + 1) - I \cdot (I + 1)}{\sqrt{I \cdot (I + 1)} \cdot j \cdot (j + 1)}$$

Damit ist die sog. **Hyperfeinstrukturenergie**

$$\Delta E_{HFS} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{g_I \cdot \mu_N \cdot B_j}{\sqrt{j \cdot (j + 1)}} \cdot \{F \cdot (F + 1) - j \cdot (j + 1) - I \cdot (I + 1)\}$$

(  $|\vec{I}| = \sqrt{I \cdot (I + 1)} \cdot \hbar$  hat sich weggekürzt)

sog. Hyperfeinstruktur-Konstante  $A$

Für den Grundzustand des Wasserstoff gilt:  $n = 1$   $l = 0$   $j = 1/2$   $I = 1/2$   $F = 0, 1$   
 $g_I = 5,58$

$$\Delta E_{HFS}(F = 0) = -\frac{3}{4}A$$

$$\Delta E_{HFS}(F = 1) = +\frac{1}{4}A \quad \text{mit} \quad A = \frac{2}{\sqrt{3}} \cdot 5,58 \cdot \mu_N \cdot B_{1/2}$$

$$A \approx 6 \cdot 10^{-6} \text{ eV} \quad \rightarrow \quad \nu \approx 1,4 \text{ GHz} \quad \lambda \approx 21 \text{ cm}$$

Der Übergang zwischen  $F = 0$  und  $F = 1$  im Zustand  $1s_{1/2}$  hat eine Wellenlänge von ca. 21 cm. Diese Linie im Wasserstoffspektrum wird auch H-I-Linie genannt und spielt in der Radioastronomie eine große Rolle, weil sich mit ihrer Beobachtung die Verteilung des Wasserstoff ermitteln lässt.

