

Experimentalphysik Modul PH-EP4 / PH-DP-EP4

Script für Vorlesung 14. Mai 2009

5 Das Wasserstoffatom

5.3 Vergleich der Schrödinger Theorie mit den experimentellen Befunden

Da Wasserstoff nur in molekularer Form als H_2 vorkommt gestaltet sich die experimentelle Untersuchung schwierig. Untersucht man beispielsweise bei hohen Temperaturen ($T= 1500 - 2000K$) oder in Gegenwart von Katalysatoren dissoziierte oder durch Elektronenstoß gesplante H_2 Moleküle, so stellt man fest, dass sich, wie im Kapitel über das Bohrsche Atommodell beschrieben, die Emissionslinien in Serien anordnen lassen, die in guter Näherung durch die einfache Formel:

$$\bar{\nu}_{ik} = Ry \cdot \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_k^2} \right) \quad (1)$$

beschrieben werden kann.

Bei genaueren spektralen Auflösungen stellt man jedoch signifikante Abweichungen fest:

- Die Wellenzahlen $\bar{\nu}_{ik}$ hängen außerdem schwach von der Bahndrehimpulsquantenzahl l ab.
- Die Spektrallinien des s-Niveaus ($l = 0$) sind in **Dubletts** aufgespalten, diejenigen mit $l > 0$ sogar aus mehreren.
- Nur bei wenigen Atomen lässt sich die Aufspaltung im Magnetfeld durch den **normalen Zeeman-Effekt** beschreiben. Beim H-Atom sieht das Aufspaltungsbild völlig anders aus.
- Der Grundzustand ($n = 1, l = 0$) zeigt eine sehr feine Aufspaltung in zwei Komponenten (Hyperfeinstruktur) beim H-Atom, diese hat für das Deuterium Isotop 2_1H einen anderen Wert als für 1_1H .

5.4 Relativistische Korrektur der Energieterme

Die Abhängigkeit der Wellenzahlen bei verschiedenen Übergängen vom Bahndrehimpuls lässt sich durch die Berücksichtigung der relativistischen Massenzunahme erklären.

Wir müssen von der nichtrelativistische Energieformel

$$E = p^2/2m + E_{Pot} \quad (2)$$

zum relativistischen Energiesatz

$$E = c \cdot \sqrt{m_0^2 c^2 + p^2} - m_0 c^2 + E_{Pot} \quad (3)$$

übergehen. Mit der Reihenentwicklung des Ausdrucks

$$\sqrt{1 + \frac{p^2}{m_0^2 c^2}} = 1 + \frac{1}{2} \frac{p^2}{m_0^2 c^2} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m_0^4 c^4} + \dots$$

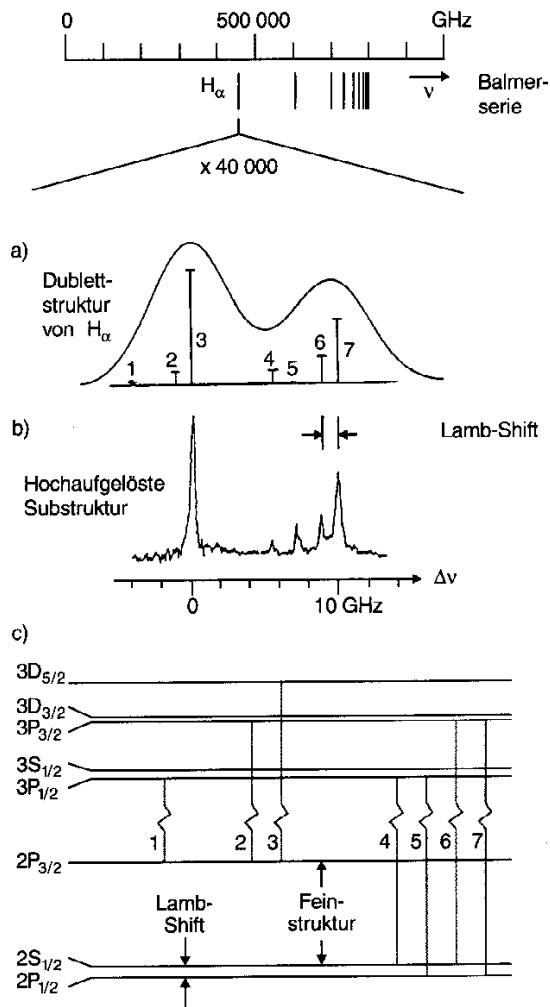


Abb. 5.14a-c. Feinstruktur der Balmer- α -Linie, gemessen (a) mit konventioneller hochauflösender Spektroskopie, (b) mit höchstauflösender Laserspektroskopie. (c) Termschema

erhalten wir

$$\begin{aligned}
 E &= \left(\frac{p^2}{2m_0} + E_{\text{Pot}} \right) - \frac{p^4}{8m_0^4c^4} + \dots \\
 &= E_{nr} - \Delta E_r.
 \end{aligned}
 \tag{4}$$

Für

$$E_{\text{kin}} \ll m_0c^2 \Rightarrow \frac{p^2}{2m_0^2c^2} \ll 1$$

kann man die höheren Glieder der Reihenentwicklung vernachlässigen. Dann stellt der letzte Term in (4) die relativistische Korrektur ΔE_r zur nichtrelativistischen Energie (2) dar.

Der Erwartungswert dieser Energiekorrektur ist wegen $\hat{p} = -i\hbar\nabla$

$$\Delta E_r = \frac{\hbar^4}{8m_0^3c^2} \int \psi_{n,l,m}^* \nabla^4 \psi_{n,l,m} d\tau.
 \tag{5}$$

Tabelle 5.4. Vergleich zwischen gemessenen und nach der Rydbergformel berechneten Wellenzahlen der Balmer-Serie im H-Atom

	n	$\lambda_{\text{Luft}}/\text{\AA}$	$\bar{\nu}_{\text{vac}}/\text{cm}^{-1}$	ν_{Ry}/cm^{-1}
H $_{\alpha}$	3	6562,79	15233,21	15233,00
H $_{\beta}$	4	4861,33	20564,77	20564,55
H $_{\gamma}$	5	4340,46	23032,54	23032,29
H $_{\delta}$	6	4101,73	24373,07	24372,80
H $_{\epsilon}$	7	3970,07	25181,33	25181,08
H $_{\zeta}$	8	3889,06	25705,84	25705,68
H $_{\eta}$	9	3835,40	26065,53	26065,35
H $_{\theta}$	10	3797,91	26322,80	26322,62
H $_{\iota}$	11	3770,63	26513,21	26512,97
H $_{\kappa}$	12	3750,15	26658,01	26657,75
H $_{\lambda}$	13	3734,37	26770,65	26770,42
H $_{\mu}$	14	3721,95	26860,01	26859,82
H $_{\nu}$	15	3711,98	26932,14	26931,94

Setzt man für $\psi_{n,l,m}$ die Wasserstoffwellenfunktionen ein, so erhält man als Energieverschiebung den sog. *Darwin-Term* (vgl. Demtr. Aufgabe 5.6):

$$\Delta E_r = \frac{E_{nr} \cdot Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l + 1/2} \right) \quad (6)$$

Dabei ist

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx 7,297 \cdot 10^{-3} \approx \frac{1}{137} \quad (7)$$

die **Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante**.

Die Gesamtenergie eines Zustandes (n, l) ist dann

$$E_{n,l} = -Ry \frac{Z^2}{n^2} \left[1 - \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l + 1/2} \right) \right]. \quad (8)$$

Man sieht daraus, dass

- die Energieverschiebung für den Grundzustand ($n = 1$) am größten ist
- sie von n und von l abhängt. Durch die relativistische Korrektur wird die Energieentartung der Zustände (n, l) aufgehoben.

5.5 Elektronenspin

Die Feinstruktur in den Spektren der Atome, der anomale Zeeman-Effekt und das Stern-Gerlach-Experiment deuten darauf hin, dass Elektronen eine weitere Eigenschaft besitzen müssen, die mit einem magnetischen Moment μ_s verknüpft ist und die **Elektronenspin** genannt wird.

5.5.1 Stern-Gerlach-Experiment

Von *Otto Stern* und *Walter Gerlach* wurden 1921 Silberatome in x-Richtung durch ein inhomogenes Magnetfeld B_z geleitet und auf einer Glasplatte in der $x = x_0$ Ebene kondensiert.

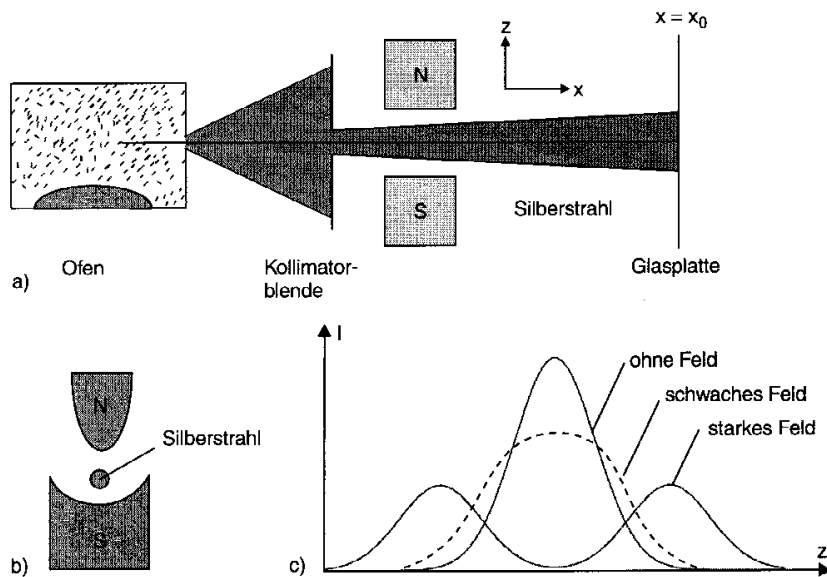


Abb. 5.15a-c. Stern-Gerlach-Versuch. (a) Versuchsaufbau; (b) Schnitt in der y - z -Ebene durch das inhomogene Magnetfeld; (c) Schwärzungintensität $I(z)$ auf der Glasplatte mit und ohne Magnetfeld

- Ohne Magnetfeld ergab sich eine Dichteverteilung, die der Intensitätsverteilung des unabgelenkten Atomstrahls entsprach.
- Nach Einschalten des Feldes spaltete sich das zentrale Maximum in zwei Maxima auf der x -Achse auf.
- Hieraus lässt sich schließen, dass auf die Silberatome eine ablenkende Kraft in $\pm z$ -Richtung wirkt und dass diese daher ein magnetisches Moment besitzen müssen.

Die Kraft F auf einen magnetischen Dipol mit Dipolmoment p_m im inhomogenen Magnetfeld ist gegeben durch (vgl. Demtr. Bd. 1, Kap 3.5)

$$F = -p_m \text{grad}B$$

mit dem Vektorgradienten (Tensor) $\text{grad}B$.

Da das Silberatom im Grundzustand ein s -Zustand mit $l = 0$ ist und daher kein magnetisches Bahnmoment besitzt stellten *Gouldsmit* und *Uhlenbeck* die Hypothese auf, dass das Elektron einen Eigendrehimpuls, den **Elektronenspin** s besitzt.

Man erhält:

- Mit den üblichen Drehimpulsregeln muss sein Betrag

$$|s| = \sqrt{s \cdot (s + 1)}\hbar \quad (9)$$

genügen und durch eine Quantenzahl s beschrieben werden.

- die Projektion auf die z -Richtung

$$s_z = m_s \cdot \hbar \quad (10)$$

- Man erhält für das **magnetische Spinnmoment**

$$\mu_s = \gamma \cdot s \quad (11)$$

wobei die experimentell bestimmte Proportionalitätskonstante γ **gyromagnetisches Verhältnis** genannt wird.

- Nur das Valenzelektron ist für das magnetische Moment verantwortlich, die anderen Elektronen kompensieren sich gegenseitig.
- Wegen $-s \leq m_s \leq +s$, $\Delta m_s = \pm 1$ und der experimentell ermittelten Aufspaltung in genau zwei Teilstrahle muss gelten

$$s = 1/2 \Rightarrow m_s = \pm 1/2. \quad (12)$$

- Der Betrag des Elektronenspins ist dann:

$$|s| = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \frac{1}{3} \sqrt{3} \cdot \hbar \quad (13)$$

- und sein Betrag in Magnetfeldrichtung (z-Richtung)

$$s_z = \pm 1/2\hbar. \quad (14)$$

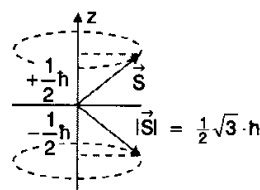


Abb. 5.16. Die beiden möglichen Einstellungen des Elektronenspins bezüglich der Magnetfeldrichtung (z-Richtung).

5.5.2 Einstein-de-Haas-Effekt

Ursprünglich von *Einstein* vorgeschlagenes, 1915 von *de Haas* durchgeführtes Experiment zur Bestimmung des Verhältnisses von magnetischem Moment des Elektrons zum Elektronenspin.

Ein Eisenzylinder (Masse m , Radius R) wird an einem dünnen Faden in das Magnetfeld $B = (0, 0, B_z = B)$ einer stromdurchflossenen Spule gehängt. Das Magnetfeld ist so stark, dass die Magnetisierung des Zylinders gesättigt ist.

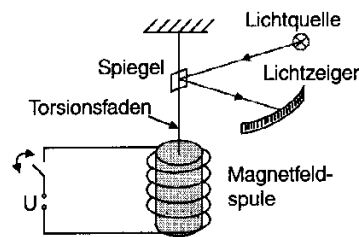


Abb. 5.17. Einstein-de Haas-Effekt

- Wird jetzt das Magnetfeld umgepolt, so klappen alle Spinmomente μ_s der N Elektronen im Zylinder um. Dies ergibt eine Änderung der Magnetisierung:

$$\Delta M = 2M = 2N \cdot \mu_{sz} \quad (15)$$

Das Produkt $N \cdot \mu_{sz}$ lässt sich aus der Messung der Magnetisierung bestimmen.

- Das Umklappen der Spins bewirkt eine Änderung des Mechanischen Drehimpulses (Drehimpulserhaltung)

$$\Delta s = 2Ns_z = N \cdot \hbar = -L = -I \cdot \omega, \quad (16)$$

- Mit dem mechanischen Trägheitsmoment $I = 1/2mR^2$ ergibt sich die Rotationsenergie zu

$$E_{\text{Rot}} = \frac{L^2}{2I} = \frac{N^2\hbar^2}{mR^2} = D_r\phi, \quad (17)$$

wobei D_r das rücktreibende Moment der Torsion und ϕ der Winkel ist.

- Aus den Messgrößen ΔM und $\Delta s = \sqrt{D_r\phi mR^2}$ lässt sich das gyromagnetische Verhältnis

$$\frac{\Delta M}{\Delta s} = \frac{\mu_{sz}}{s_z} = \frac{\mu_s}{s} = \gamma_s \quad (18)$$

experimentell bestimmen.

- Man erhält

$$\gamma_s \approx \frac{e}{m_e} = 2\gamma_l \quad (19)$$

Das Verhältnis von magnetischem Moment zu mechanischem Drehimpuls ist beim Elektronenspin doppelt so groß wie beim Bahndrehimpuls.

- Man schreibt analog zum magnetischen Bahnmoment

$$\mu_s = -g_s(\mu_B\hbar) \cdot s \quad (20)$$

und nennt $g_s \approx 2$ den **Landé-Faktor**

- der Betrag der magn. Spinmomente ist dann wegen $|s| = \sqrt{3/4}\hbar$

$$|\mu_s| = 2(\mu_B/\hbar) \cdot \sqrt{3/4}\hbar = \sqrt{3}\mu_B \quad (21)$$

Anmerkung der genaue Wert des Landé-Faktors $g_s = 2,0023$ kann mit Hilfe der Dirac-Theorie, die den Elektronenspin berücksichtigt, berechnet werden.

5.5.3 Spin-Bahn-Kopplung; Feinstruktur

Wie zuvor beschrieben spalten die Energierme des H-Atoms für $l \geq 1$ in zwei Komponenten, dies wird **Feinstruktur** genannt.

Wieder wählen wir das halbklassische Modell in dem wir Drehimpulse als Vektoren behandeln, deren Beträge und z-Komponenten gequantelt sind.

Im Koordinatensystem des Elektrons bewegt sich der Kern im der Frequenz ν um de Ursprung, in dem das Elektron sich befindet. Der Kreisstrom $Ze\nu$ erzeugt nach dem Biot-Savart-Gesetz mit $l = m \cdot r \times v$ das Magnetfeld

$$B_l = \frac{\mu_0 Ze}{4\pi r^3} (v \times (-r)) = + \frac{\mu_0 Ze}{4\pi r^3 m} l \quad (22)$$

Der Elektronenspin in diesem Magnetfeld hat $s_z = \pm 1/2\hbar$. Die dadurch bewirkte Zusatzenergie wird nach (??) und (20)

$$\begin{aligned} \Delta E &= -\mu_s \cdot B_l = g_s \cdot \mu_B \cdot \frac{\mu_0 Ze}{4\hbar\pi m_e r^3} (s \cdot l) \\ &\approx \frac{\mu_0 Ze^2}{4\pi m_e r^3} (s \cdot l) \end{aligned} \quad (23)$$

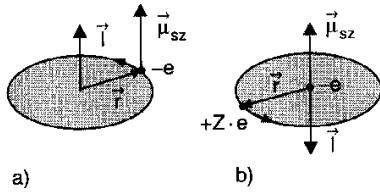


Abb. 5.18a,b. Halbklassisches Modell der Spin-Bahn-Wechselwirkung. (a) Im Ruhesystem des Kerns kreist das Elektron um den Kern; (b) im Ruhesystem des Elektrons kreist der Kern um das Elektron

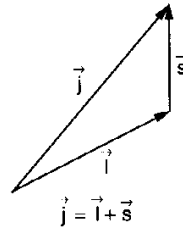


Abb. 5.19. Vektormodell der Kopplung des Bahndrehimpulses l und des Spins s zum Gesamtdrehimpuls $j = l + s$

Bei der Rücktransformation (Lorenztransformation) in das Ruhesystem des Kerns ergibt sich ein zusätzlicher Faktor $1/2$ (**Thomasfaktor**), weil der Elektronenspin bei der Bewegung um den Kern sich gegenüber dem Laborsystem dreht (**Thomas-Präzession**).

Damit spalten sich die Termwerte, die ohne Berücksichtigung des Spins erhalten wurden, durch die **Spin-Bahn-Kopplungsenergie** auf die Werte

$$\begin{aligned} E_{n,l,s} &= E_n - \boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}_l \\ &= E_n + \frac{\mu_0 Z e^2}{8\pi m_e^2 r^3} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{l}) \end{aligned} \quad (24)$$

auf. Das Skalarprodukt $(\mathbf{s} \cdot \mathbf{l})$ kann je nach Spinstellung positiv oder negativ sein. Führen wir den Gesamtdrehimpuls

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s} \quad \text{mit} \quad |j| = \sqrt{j(j+1)}\hbar \quad (25)$$

des Elektrons ein, so ergibt sich durch quadrieren von (25) die Relation

$$\begin{aligned} \mathbf{s} \cdot \mathbf{l} &= \frac{1}{2} [j^2 - l^2 - s^2] \\ &= \frac{1}{2} \hbar^2 [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \end{aligned} \quad (26)$$

Damit lässt sich (24) schreiben als

$$E_{n,l,j} = E_n + \frac{a}{2} \cdot [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \quad (27)$$

mit der Spin-Bahn-Kopplungskonstante

$$a = \frac{\mu_0 Z e^2 \hbar^2}{8\pi m_e^2 r^3}$$

Die Energieeigenwerte $E_{n,l}$ spalten je nach Spinstellung auf in die Komponenten mit $j = l \pm 1/2$. Der Mittelwert \bar{a} der Kopplungskonstante lässt sich mit Hilfe des Erwartungswertes von $1/r^3$ bestimmen

$$\bar{a} = \frac{\mu_0 Z e^2 \hbar^2}{8\pi m_e^2} \cdot \int \psi_{n,l,m}^* \frac{1}{r^3} \psi_{n,l,m} d\tau. \quad (28)$$

Setzt man die Wasserstoffwellenfunktion ein erhält man

$$\bar{a} = -E_n \frac{z^2 \alpha^2}{n \cdot l(l+1/2)(l+1)}, \quad (29)$$

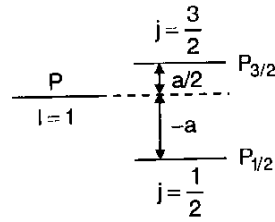


Abb. 5.20. Feinstrukturaufspaltung eines p -Terms mit $l = 1$

wobei $\alpha \approx 1/137$ die bereits bei der relativistischen Korrektur auftretende Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante ist.

Der Abstand zwischen den beiden Spin-Bahn-Komponenten ($n, l, j = l \pm 1/2$) ist dann

$$\Delta E_{l,s} = \bar{a} (l + 1/2) = -E_n \cdot \frac{Z^2 \alpha^2}{n \cdot l(l+1)} \approx -5,3 \cdot 10^{-5} E_n \cdot \frac{z^2}{n \cdot l(l+1)}. \quad (30)$$

Die Aufspaltung ist also sehr klein gegenüber den Energietermen E_n , sie heißt deshalb **Feinstruktur**.

Man sieht aus (30), dass die Feinstrukturaufspaltung mit wachsenden Quantenzahlen n und l abnimmt, wegen $E_n \propto Z^2/n^2$ gilt

$$\Delta E_{l,s} \propto \frac{Z^4}{n^3 l(l+1)} \quad (31)$$

Berücksichtigt man die relativistische Korrektur und die Feinstrukturaufspaltung erhält man

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

5.5.4 Anomaler Zeeman-Effekt

- Unter bestimmten Bedingungen ist der Elektronenspin s und das korrespondierende magnetische Moment μ_s bei der Beschreibung der Aufspaltung der Atomzustände im Magnetfeld \mathbf{B} zu berücksichtigen. Die zuvor erklärte normale Aufspaltung tritt bei $\mathbf{S} = \sum \mathbf{s}_i = \mathbf{0}$ auf. Der Gesamtdrehimpuls $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ ist ohne Magnetfeld zeitlich konstant, wenn l und s um j präzedieren. Wenn ein äußeres Magnetfeld schwächer ist als das Magnetfeld aufgrund der Bewegung des Elektrons, so bleibt die Spin-Bahn-Kopplung erhalten bzw. $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ gültig mit $j = \sqrt{j(j+1)}\hbar$. Die Richtung von \mathbf{j} ist nicht mehr raumfest, weil μ_j im Magnetfeld ein Drehmoment $\mathbf{D} = \mu_j \times \mathbf{B}$ erfährt, wobei $j_z = m_j \cdot \hbar$ mit $-j \leq m_j \leq j$ gilt.
- Mit $\mu_l = \mu_B \cdot l/\hbar$ und $\mu_s = g_s \cdot \mu_B \cdot s/\hbar$ folgt für das Gesamtmoment

$$\mu_j = \frac{e}{2m_e} (\mathbf{l} + g_s \mathbf{s}) \quad (33)$$

Der zeitliche Mittelwert vom μ_j ist die Projektion von μ_j auf \mathbf{j} :

$$\langle \mu_j \rangle = (\mu_j)_j = \frac{\mu_j \cdot \mathbf{j}}{|\mathbf{j}|} = \frac{e}{2m_e} \left(\frac{\mathbf{l} \cdot \mathbf{j}}{|\mathbf{j}|} + g_s \cdot \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{j}}{|\mathbf{j}|} \right) \quad (34)$$

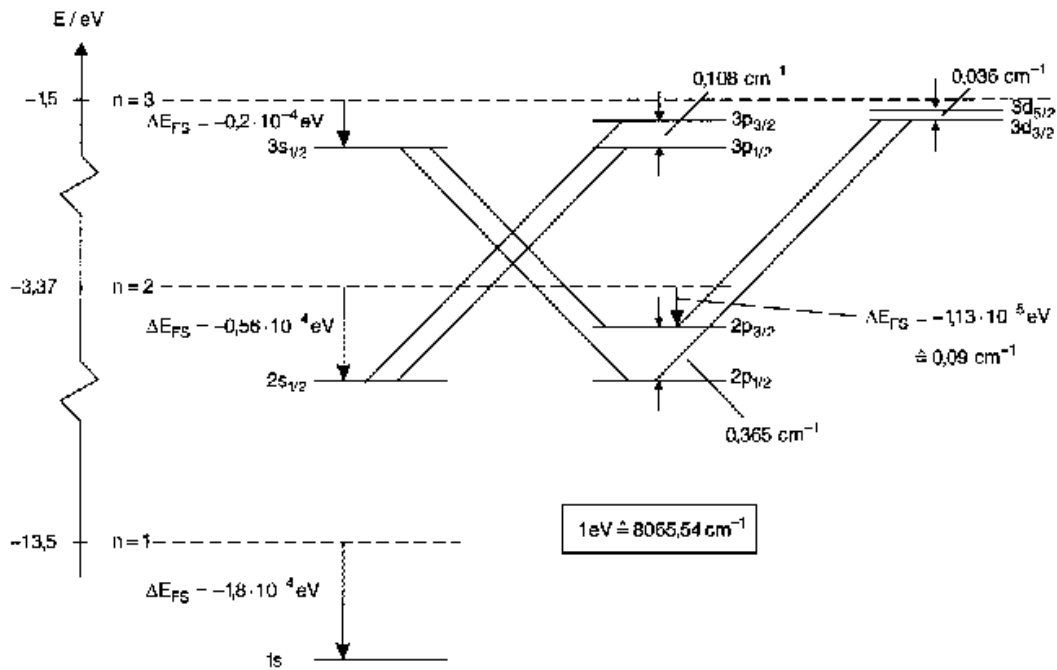


Abb. 5.21. Termschema des H-Atoms bei Berücksichtigung der relativistischen Massenzunahme und der Feinstruktur-
spaltung. Die gestrichelten Geraden geben die Lage der Energieniveaus E_n als Lösungen der Schrödingergleichung an

Aus $j = l + s$ folgen

$$l + j = \frac{1}{2}[j^2 + l^2 - s^2] = \frac{1}{2}[j(j+1) + [l(l+1) + s(s+1)]]\hbar \text{ und}$$

$$s \cdot j = \frac{1}{2}[j(j+1) + l(l+1) - s(s+1)]\hbar^2.$$

Mit $\mu_B = (e/2m_e)\hbar$ und $g_s \approx 2$ ergibt sich für $\langle \mu_j \rangle$:

$$\langle \mu_j \rangle = -\frac{3j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2 \cdot \sqrt{j(j+1)}} \mu_B = g_j \cdot \sqrt{j(j+1)} \mu_B = g_j \mu_B \cdot |j|/\hbar \quad (35)$$

mit dem Landé-Faktor $g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$

- In einem äußeren Magnetfeld $B = \{0, 0, B_z\}$ hat der Gesamtdrehimpuls j die Projektionen

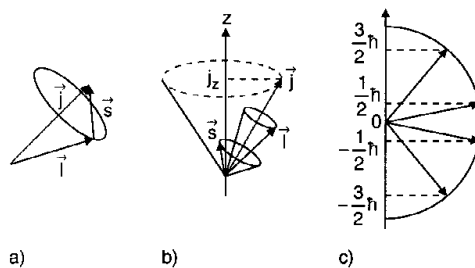


Abb. 5.22. (a) Kopplung von l und s zu $j = l + s$; (b) Präzession von j um die z -Richtung in einem äußeren Magnetfeld; (c) z -Komponente $j_z = m_j \cdot \hbar$

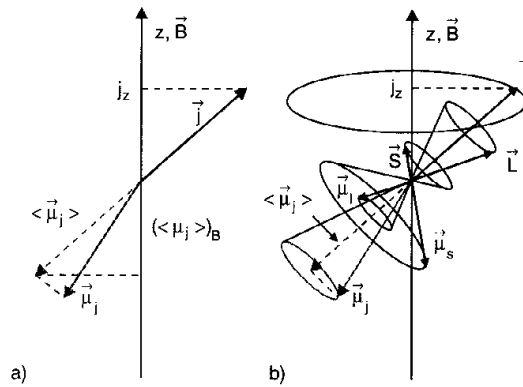


Abb. 5.23. (a) Projektion von μ_j auf die Richtung von j ; (b) Präzession aller magnetischen Momente und Drehimpulse um die Magnetfeldrichtung

$j_z = m_j \hbar$ mit $-j \leq m_j \leq j$. Die z-Komponente des mittleren magnetischen Momentes ist daher: $\langle \mu_j \rangle_z = -m_j \cdot g_j \cdot \mu_B$

- Die zusätzliche Energie im Magnetfeld beträgt:

$$E_{m_j} = -\langle \mu_j \rangle_z \cdot B = -m_j \cdot g_j \cdot \mu_B \cdot B \quad (36)$$

mit der Energiedifferenz für m_j und $m_j - 1$

$$\Delta E_{m_j, m_j-1} = g_j \cdot \mu_B \cdot B \quad (37)$$

Die Aufspaltung der Niveaus ist von (j, l) abhängig. Im allgemeinen werden komplizierte Aufspaltungsbilder mit mehr als drei Linien beobachtet. Als Beispiele sind die Aufspaltungen der beiden Übergänge $^2S_{1/2} \rightarrow ^2P_{1/2, 3/2}$ für das Na-Atom gezeigt.

- Übergänge mit $\Delta m_j = \pm 1$ führen zu zirkular polarisierter, $\Delta m_j = 0$ -Übergänge zu linear polarisierter Strahlung mit dem E-Vektor in Magnetfeldrichtung.

5.6 Hyperfeinstruktur

- Der Atomkern wurde bisher als eine punktförmige Ladung beschrieben, die über das Coulombpotential mit dem Elektron wechselwirkt. Durch die Wechselwirkung des magnetischen Moments des Elektronenspins mit dem magnetischen Moment aufgrund seiner Bahnbewegung wurde die Feinstruktur erklärt. Bei sehr hoher spektraler Auflösung wird eine weitere Aufspaltung der Spektrallinien beobachtet, die Hyperfeinstruktur genannt wird.
- Die Hyperfeinstruktur wird dadurch erklärt, dass die Atomkerne eine endliche Ausdehnung und außer der Ladung auch einen Kernspin I haben können, dessen Betrag durch die Kernspinquantenzahl I nach

$$|I| = \sqrt{I(I-1)} \hbar \quad (38)$$

beschrieben wird. Seine Projektion auf die z-Richtung kann analog zum Elektronendrehimpuls $2I + 1$ Werte

$$I_z = m_I \cdot \hbar \text{ mit } -I \leq m_I \leq +I \quad (39)$$

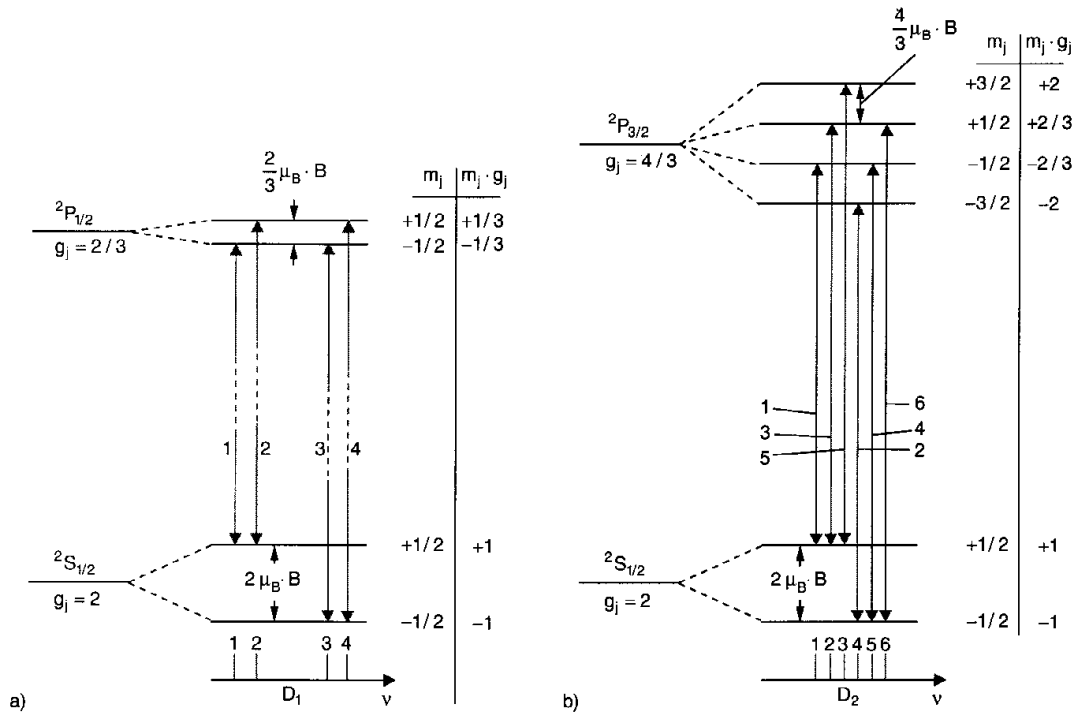


Abb. 5.24a,b. Anomaler Zeeman-Effekt der beiden Übergänge (a) $3P_{1/2} \leftrightarrow 3S_{1/2}$ und (b) $3P_{3/2} \leftrightarrow 3S_{1/2}$ im Na-Atom, ohne Berücksichtigung der Hyperfeinstruktur

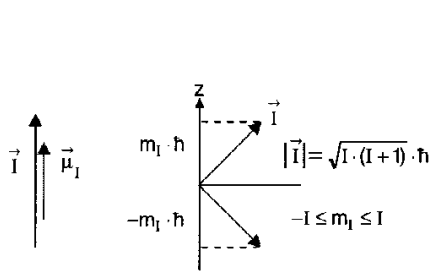


Abb. 5.25. Kernspin I , magnetisches Kernmoment μ_I und Komponenten $I_z = m_I \hbar$

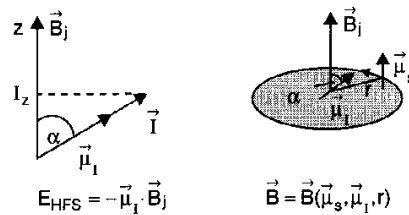


Abb. 5.26. Wechselwirkung zwischen magnetischem Kernmoment μ_I und dem Magnetfeld $B_{int} = B_j$, das durch die Bahnbewegung des Elektrons und durch sein magnetisches Spinnmoment μ_s erzeugt wird.

Das mit dem Kernspin verknüpfte Magnetische Kernmoment

$$\mu_I = \gamma_K \cdot I \tag{40}$$

hat als Einheit analog zum Bohrschen Magneton das Kernmagneton:

$$\mu_K = \frac{2}{2m_p} \cdot \hbar = \frac{m_e}{m_p} \cdot \mu_B = \frac{\mu_B}{1836} = 5,05 \cdot 10^{-27} \text{JT}^{-1} \tag{41}$$

Das magnetische Kernmoment des Protons ist $\mu_I(P) = 2,79 \mu_K$.

- Analog zum magnetischen Moment des Elektrons lässt sich schreiben:

$$\mu_K = \gamma_K \cdot I = g_I \cdot \frac{\mu_K}{\hbar} I \tag{42}$$

mit dem Kern-g-Faktor $g_I = \gamma_K \cdot \frac{\hbar}{\mu_K}$. Das magnetische Kernmoment interagiert mit dem Magnetfeld, das von den Elektronen am Kernort erzeugt wird und mit dem elektronischen

magnetischen Moment. Die Energie des kernmagnetischen Moments im vom Elektron mit Drehimpuls $j = l + s$ erzeugten inneren Magnetfeld $B_{int} = B_j$ berechnet sich nach:

$$E_{I,j} = -\boldsymbol{\mu}_I \cdot \mathbf{B}_{int} = -|\boldsymbol{\mu}_I| \cdot \cos(\angle(j, I)) \quad (43)$$

Mit dem Gesamtdrehimpuls $F = J + I$ ergibt sich wegen $j \cdot I = \frac{1}{2}(F^2 - j^2 - I^2)$

$$\cos(\angle(j, I)) = \frac{j \cdot I}{|j| \cdot |I|} = \frac{1}{2} \frac{F(F+1) - J(J+1) - I(I+1)}{\sqrt{j(j+1) \cdot I(I+1)}} \quad (44)$$

woraus sich die Hyperfeinenergie des H-Atoms ergibt:

$$\Delta E_{HFS} = \frac{A}{2} \cdot [F(F+1) - j(j+1) - I(I+1)] \quad (45)$$

mit der Hyperfeinkonstante

$$A = \frac{g_I \cdot \mu_K \cdot B_j}{\sqrt{j(j+1)}} \quad (46)$$

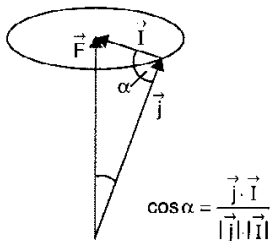


Abb. 5.27. Kopplung von Elektronengesamtdrehimpuls $j = l + s$ und Kernspin I zum raumfesten Gesamtdrehimpuls des Atoms $F = j + I$

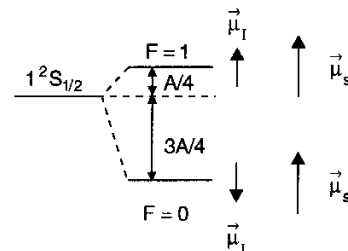


Abb. 5.28. Hyperfeinstruktur des Wasserstoffgrundzustands $1^2S_{1/2}$. Die Konstante A beträgt hier $0,0474 \text{ cm}^{-1}$

- Die Energieniveaus spalten sich in Hyperfeinstrukturkomponenten auf:

$$E_{HFS} = E_{n,l,j} + \frac{A}{2} [F(F+1) - j(j+1) - I(I+1)] \quad (47)$$

Experimente ergeben für das Proton: $I = \frac{1}{2}, g_I = 5,58 \Rightarrow \mu_{Iz} = \pm 2,79 \mu_K$. Der H-Grundzustand ist $j = 1/2, I = 1/2 \Rightarrow F = 0$ oder $F = 1$.

$$\Rightarrow E_{HFS}(F=0) = E_{1,0,1/2} - \frac{3}{4}A \text{ bzw. } E_{HFS}(F=1) = E_{1,0,1/2} - \frac{3}{4}A \quad (48)$$

Außer vom Drehimpuls des Elektrons am Ort des Kerns hängt das innere Magnetfeld auch von der Aufenthaltswahrscheinlichkeit ab. Für S-Zustände ergibt sich

$$A = \frac{2}{3} \mu_0 g_e \mu_B g_I \mu_K |\psi_n(\mathbf{r} = \mathbf{0})|^2 \quad (49)$$

Die entsprechende Abbildung (Demtr. 5.28) zeigt die Hyperfeinstructuraufspaltung des $1^2S_{1/2}$ -Grundzustandes. Abbildung 5.29 zeigt die Aufspaltung für den Übergang $2S \leftarrow 1S$. Der magnetische Dipolübergang zwischen den beiden Hyperfeinstructurkomponenten hat eine Wellenlänge von $\lambda = 21 \text{ cm}$. Der zweite Beitrag zur Hyperfeinstructurläßt sich als eine Wechselwirkung zwischen den Dipolen des Kerns und der Elektronenhülle ansehen. Er spielt nur für Zustände mit $l \geq 1$ eine Rolle, da hier die Elektronendichte am Kern Null ist. Größere Atome können auch ein Quadrupolmoment haben, das einen weiteren Beitrag zur Feinstruktur liefert.

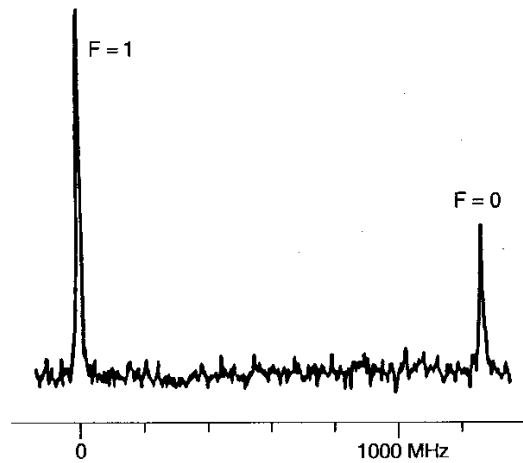


Abb. 5.29. Die beiden aufgelösten Hyperfeinstrukturkomponenten bei der dopplerfreien Zweiphotonen-Absorptionsspektroskopie des Übergangs $2S \leftarrow 1S$ im H-Atom. Aus G. F. Bassani, M. Inguscio, T. W. Hänsch (eds.): *The Hydrogen Atom* (Springer, Berlin, Heidelberg 1989)

- Der Paschen-Back-Effekt tritt bei der Hyperfeinstruktur bei sehr kleinen Magnetfeldern auf. Die Hyperfeinstrukturkomponente $F = 1$ wird in drei Zeeman-Komponenten mit $m_f = +1, 0, -1$ aufgespalten, wenn die Wechselwirkung $\mu_s \cdot \mathbf{B} < \Delta E_{HFS}$. Wenn $\mu_G F \cdot \mathbf{B} > \Delta E_{HFS}$ gilt, entkoppeln s und I . Daher bestimmt $\mu_s \cdot \mathbf{B}$ die Komponenten. Je nach Stellung von s zu \mathbf{B} gibt es zwei Zeeman-Komponenten mit $s_z = \pm 1/2\hbar$ mit jeweils zwei Unterkomponenten mit $I_z = \pm 1/2\hbar$.