

d) Zusammenfassung des Energiekorrekturen f. 1 Elektronatom

$$\Delta E = \sum_i \Delta E_i \quad (\text{Dispersionskorrektur, Darwin-Korrektur, Spin-Bahn u. W.})$$

$$\Delta E_1 = \underbrace{Ryd (Z\alpha)^2}_{\text{Stark Klein Größe}} \underbrace{\frac{1}{4} \left(\frac{3}{4} - \frac{4}{l + \frac{1}{2}} \right)}_{\text{Quantenzahl abhängig}} \quad Ryd = \frac{1}{2} m_0 c^2 (Z\alpha)^2$$

$$\Delta E_2 = Ryd (Z\alpha)^2 \frac{1}{4^3} \delta_{l,0} \quad \text{nur s-Zustände}$$

$$\Delta E_3 = \left\{ \begin{array}{l} 0 \\ \frac{1}{2} Ryd (Z\alpha)^2 \frac{1}{4^3} \frac{1}{l(l+1)(l+\frac{1}{2})} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} l=0 \\ \cdot l \text{ wenn } j = l + \frac{1}{2} \\ \cdot (-l-1) \text{ wenn } j = l - \frac{1}{2} \end{array} \right\}$$

$$\Delta E = \Delta E_{ue} \rightarrow \Delta E_{uj} \quad (\text{wird gezeigt})$$

1. Fall $l=0$

$$\begin{aligned} \Delta E_{ue=0} &= \Delta E_1 + \Delta E_2 = Ryd (Z\alpha)^2 \frac{1}{4^4} \left(\frac{3}{4} - 2u + 4 \right) \\ &= Ryd (Z\alpha)^2 \frac{1}{4^4} \left(\frac{3}{4} - u \right) \end{aligned}$$

2. Fall $l \neq 0$

$$\Delta E_{ue} = \Delta E_1 + \Delta E_3 = Ryd (Z\alpha)^2 \frac{1}{4^3} \left(\frac{3}{4} - \frac{1}{4u} + \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{(l+1)(l+\frac{1}{2})} \right\} \right)$$

Zusammen fassen und da $l = j - \frac{1}{2}$, unter $l = j + \frac{1}{2}$

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

Vergleiche die Formel f. $l=0, l \neq 0$ mit dem Fall $l=0 \rightarrow j = \frac{1}{2}$

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

relativist. Energie korrekturen bei 1 Elektron Atom mit k -Quantenzahl l

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

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

$$\underline{j = \frac{1}{2}} \quad ; \quad \underline{n=1, l=0} \quad ; \quad \underline{n=2, l=0, 1} \quad \text{(Schrödinger: } E_n \text{)}$$

$$\quad \quad \quad \underline{j = \frac{1}{2}} \quad \quad \quad \underline{j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}} \quad \text{(Dirac: } E_{nj} \text{)}$$

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

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

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

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

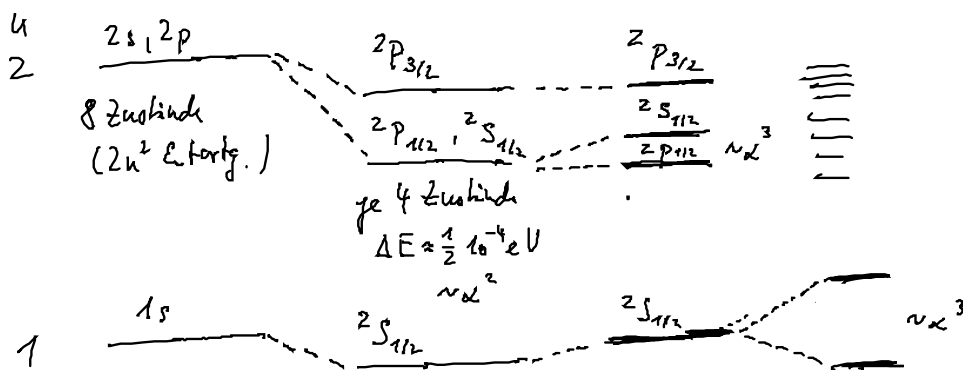
Schrödinger: $u \ell$ Dirac: $n \ell_j^{2s+1}$

1s: $|u \ell s m_\ell m_s\rangle \rightarrow |1^2 S_{1/2}\rangle$
 $|1, 0, \frac{1}{2}, 0, \pm \frac{1}{2}\rangle$ $|1, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle$
 j-Zustände

2s: $|2, 0, \frac{1}{2}, 0, \pm \frac{1}{2}\rangle \rightarrow |2^2 S_{1/2}\rangle$
 2 Zustände 2 Zustände

2p: $|2, 1, \frac{1}{2}, \pm 1, \pm \frac{1}{2}\rangle \rightarrow |2^2 P_{1/2}, 2^2 P_{3/2}\rangle$
 6 Zustände 6 Zustände

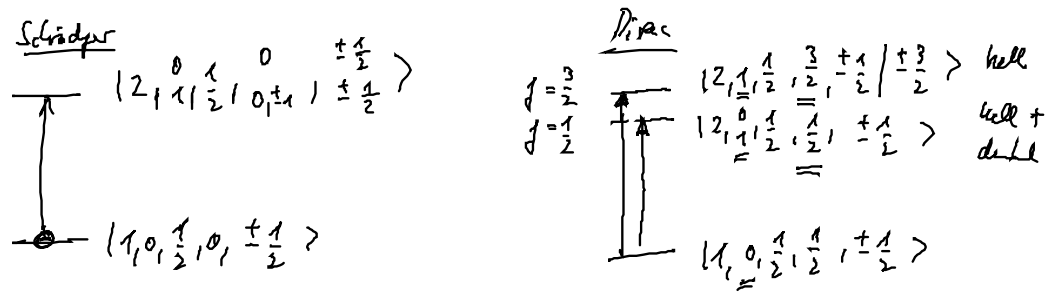
Schrödinger Dirac/Pauli W/W und Vakuum
 $E_n = -\frac{Ryd}{n^2}$ $E_{n,j}$ später



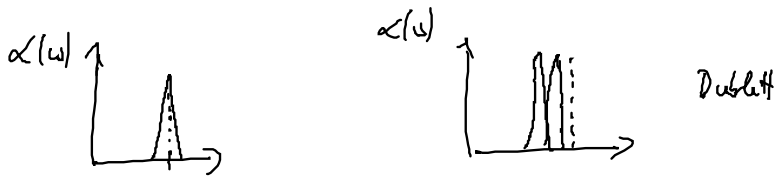
"Großstruktur" "Feinstruktur" "Lamb shift" "Kernspin-J-WW"
 ⏟
 "Hyperfeinstruktur"

E^-
 relativist. Korrektur führt zu V Aufspaltung der j -Zustände
 dabei bleibe Zustände mit gleichen l energetisch identisch
 Vorzeichenfluktuation (Starkfeld quantisierg.) haben s-p Entartg. auf

Detektion d. relativist. Korrekturen:



Optisch Auswahl $\Delta l = \pm 1$



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

Linie aufspalt. in Magnetfeld (m_j -Entartg. aufgehoben)

$$\underline{H} = \underline{H}_0 + \underline{H}_{rel} + \mu_B (\vec{L} \hat{I} + 2 \vec{S}) \cdot \vec{B}$$

H-Atom
relativ.
magnetisch Dipol
 $\vec{B} = \hat{e}_z B = \text{Konstant}$

Korrekturen
(Bahn + Spin)
 $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

\underline{H}_0^{rel}
Störung

Eigenzustände sind bekannt: $\mu_B (\vec{J} + \vec{S}) \cdot \vec{B}$

$$|u, l, s, j, m_j\rangle \quad \mu_B (\hat{J}^z + \hat{S}^z) \cdot B$$

= Störung

Wissen:

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

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

benötigen in Störpert. 1. Ordnung:

$$\langle u, l, s, j, m_j | \hat{S}^z | u, l, s, j, m_j \rangle$$

unbekannt, aber

in alt. Basis bekannt (u_+, u_-)

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

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

$$|u, l, s, j, m_j\rangle = \alpha_+ |u_{m_e}\rangle \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta_+ |u_{m_e+1}\rangle \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

=

α_+, β_+ sind Entwicklungskoeffizienten in alt. Basis

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

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

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

Eigenstate wie Eigenlyp werte, etc. müsste in f, m_j angegeben werden

$$\text{gesucht: } \langle u e s j m_j | \hat{S}^z | u e s j m_j \rangle$$

$$= \underbrace{\langle u e | u e \rangle}_1 \underbrace{\langle s j m_j | \hat{S}^z | s j m_j \rangle}_{\textcircled{1}}$$

$$\textcircled{1} \hat{S}^z \left(\alpha_+ |l m_e\rangle \begin{matrix} \vec{x}_{+1} \\ \uparrow \\ \gamma_{m_e} \end{matrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta_+ |l m_e+1\rangle \begin{matrix} \vec{x}_{-1} \\ \uparrow \end{pmatrix} \right)$$

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

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

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

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

$$\text{mit } \langle l m_e | l m_e+1 \rangle = 0, \quad \langle l m_e | l m_e \rangle = 1$$

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

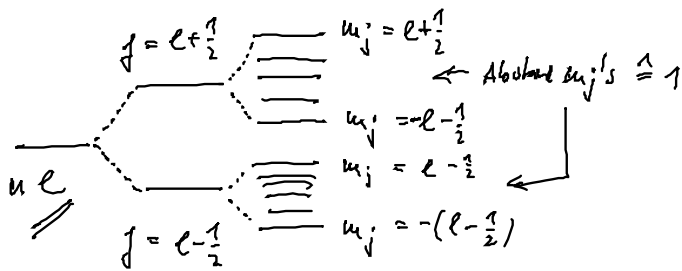
$$\begin{aligned} & \text{mit } j = l + \frac{1}{2} \\ \text{Körper QZ: } & l = j - \frac{1}{2} \\ & m_e = m_j - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

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

Energieaufspaltung in Magnetfeld:

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

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



Stromches Magnetfeld

Aufspaltung ist von l abhängig, nicht von m_j !
 (anomales Zeeman-Effekt)