

Physik IV (Atomphysik)

Vorlesung SS 2003

Prof. Ch. Berger

Zusammenfassung

Das Skript gibt eine gedrängte Zusammenfassung meiner Vorlesung an der RWTH Aachen im SS 2003. Verglichen mit vielen, auch neueren Lehrbüchern wird versucht, alte Zöpfe abzuschneiden. Sie werden also keine Diskussion des Bohrschen Atom-Modells finden, die Behandlung des Zeeman-Effekts ist auf das nötigste zusammengedrängt, der Stark-Effekt fehlt, etc.etc. Bitte weisen Sie eventuell Ihre Prüfer im Vordiplom darauf hin.

4.4 Die Feinstruktur

Eine genaue Untersuchung des Linienspektrums des Wasserstoffs zeigt eine charakteristische Abweichung von der Schrödingerschen Theorie, die Linie spalten in Multipletts mit nahe beieinander liegenden Wellenlängen auf. Häufig werden Liniendoublets beobachtet, aber es gibt auch kompliziertere Strukturen, in denen es aber immer ein intensiv leuchtendes Doublet gibt. Dies hängt mit den noch zu besprechenden Auswahlregeln zusammen. Am bekanntesten ist das Doublet der Natrium D -Linie. Die gelbe Farbe des Natriumdampfes kommt von der sog. D -Linie. Schon mit relativ einfachen Mitteln kann die Aufspaltung demonstriert werden. Im Wasserstoff sind die Aufspaltungen geringer, die $H_\alpha, H_\beta, H_\gamma$ -Linien der Balmer Serie zeigen Aufspaltungen von $(1.5, 0.8, 0.9) \cdot 10^{-2}$ nm, zum Nachweis sind also Spektralapparate mit einer Auflösung von $\approx 10^{-5}$ nötig.

Der Grund für das Auftreten der Feinstruktur ist die Wechselwirkung der magnetischen Momente des Spins und des Bahndrehimpulses des Elektrons. Die Wechselwirkungsenergie zweier klassischer Dipole ist proportional zum Produkt der magnetischen Momente, also

$$W_{FS} = a \mu_L \mu_S, \quad (254)$$

worin a eine (berechenbare) Konstante ist. Da die magnetischen Momente proportional zum Drehimpuls sind formen wir die letzte Gleichung zu

$$W_{FS} = a' \mathbf{L} \mathbf{S} \quad (255)$$

um. Hier ist die Spin-Bahn-Kopplung unmittelbar sichtbar. In der Quantenmechanik sind nicht alle Werte von $\mathbf{L} \mathbf{S}$ erlaubt. Der Spin wird sich z.B. im Magnetfeld des Bahndrehimpulses nach den Regeln der Richtungsquantisierung einstellen. In der Quantenmechanik werden die Regeln für die Zusammensetzung zweier Drehimpulse

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (256)$$

abgeleitet. Der Gesamtdrehimpuls habe die Betragsquantenzahl J , für die anderen gilt entsprechend L und S .⁸ Bei gegebenem L und S mit $L \geq S$ sind die erlaubten Werte von J durch die Folge

$$J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S| \quad (257)$$

gegeben, das sind $2S + 1$ mögliche Werte von J . Für den späteren Gebrauch geben wir noch die Regel

$$J_z = L_z + S_z \quad (258)$$

der Addition der dritten Komponenten zweier Drehimpulse in der Quantenmechanik an.

Nach den Gesetzen der Quantenmechanik wird die Korrektur an den Energietermen der Schrödinger Theorie durch das Integral

$$\Delta W_{FS} = \int \psi^* W_{FS} \psi dV \quad (259)$$

⁸Wir folgen hier dem Brauch, große Buchstaben für die Quantenzahlen zu verwenden. Das ist sehr nützlich bei Systemen mit mehreren Elektronen. Ein Verwechslung mit dem Betrag des Drehimpulses (z.B. $|\mathbf{J}| = J$) sollte durch den Kontext weitgehend ausgeschlossen sein. Für ein einzelnes Elektron verwenden wir aber weiter kleine Buchstaben für die Quantenzahlen.

berechnet, worin W_{FS} aus (254) als Operator aufgefaßt wird. Sofort taucht das Problem auf, daß zuerst die Eigenfunktionen ψ des Hamilton-Operators zu Zuständen mit definierten Werten von J, L, S gefunden werden müssen. Es ist aber ein typisches Vorgehen der quantenmechanischen Störungstheorie, im ersten Schritt die Lösungen des ungestörten Problems zu verwenden. Damit reduziert sich (254) auf ein Volumenintegral über $|R_{n,l}|^2$. Die Durchführung der Rechnung ist kompliziert, da verschiedene relativistische Korrekturen angebracht werden müssen.

Nach (139) ist der klassische Ausdruck für die kinetische Energie $W_{kin} = \alpha \hbar c / 2r$. Wenn man für r den Bohrschen Radius (144) einsetzt, folgt

$$v = \alpha c . \quad (260)$$

Es sind also offenbar relativistische Korrekturen nötig, die kompliziert sind, da es sich bei einer Kreisbahn um eine beschleunigte Bewegung handelt!

Anstelle die Berechnung dieser Korrekturen in der Schrödinger Theorie nachzuverfolgen, geben wir die die Eigenwerte der Energie eines Elektrons im Coulombfeld an, wie sie als Lösung der Dirac-Gleichung gefunden werden. Dies ist im Grunde genommen das richtige Vorgehen, da es sich ja offenbar um ein relativistisches Problem handelt und Spin und magnetisches Moment des Elektrons ebenfalls relativistische Effekte sind. Eine Behandlung der Dirac Gleichung und insbesondere ihrer Lösungen im Coulombfeld geht weit über den Rahmen dieser Vorlesung hinaus, wir können das Ergebnis nur angeben

$$W = W_{0,e} \left[1 + \frac{\alpha^2}{\left(n - (j + \frac{1}{2}) + \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - \alpha^2} \right)^2} \right]^{-\frac{1}{2}} . \quad (261)$$

Um diese komplizierte Formel zu interpretieren, entwickeln wir sie nach Potenzen von α^2 . Dazu betrachten wir die ersten Terme der Taylorreihe

$$W \approx W_{0,e} \left(1 + \frac{dW}{d\alpha^2} \alpha^2 + \frac{1}{2} \frac{d^2W}{d(\alpha^2)^2} \alpha^4 \right) . \quad (262)$$

Diese Rechnung gelingt mit MAPLE sehr einfach. Die beobachtbaren Energiewerte werden nach Abzug der Ruheenergie gefunden, $W_{n,j} = W - W_{0,e}$, und sind durch

$$W_{n,j} = W_n \left(1 - \frac{3}{4} \frac{\alpha^2}{n^2} + \frac{\alpha^2}{n(j + \frac{1}{2})} \right) \quad (263)$$

gegeben. Hierin ist W_n der Energie Eigenwert der Schrödingerschen Theorie. Die relativistisch korrekten Werte sind demgegenüber um den Wert

$$\Delta W_{FS} = \frac{R_y \alpha^2}{n^4} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \quad (264)$$

abgesenkt. Zu jedem Wertepaar (n, l) mit $l \geq 1$ gibt es zwei Werte von j

$$j = l \pm \frac{1}{2} , \quad (265)$$

| n | l | j | $^{2S+1}L_J$ | |
|-----|-----|-----|--------------|-----------|
| 1 | 0 | 1/2 | $1^2S_{1/2}$ | }entartet |
| 2 | 0 | 1/2 | $2^2S_{1/2}$ | |
| 2 | 1 | 1/2 | $2^2P_{1/2}$ | |
| 2 | 1 | 3/2 | $2^2P_{3/2}$ | }entartet |
| 3 | 0 | 1/2 | $3^2S_{1/2}$ | |
| 3 | 1 | 1/2 | $3^2P_{1/2}$ | }entartet |
| 3 | 1 | 3/2 | $3^2P_{3/2}$ | |
| 3 | 2 | 3/2 | $3^2D_{3/2}$ | |
| 3 | 2 | 5/2 | $3^2D_{5/2}$ | |

Tabelle 4: Tabelle der niedrigsten Zustände im Wasserstoff bei Berücksichtigung der Feinstruktur.

wobei die Regeln für die Quantenzahlen wie in der Schrödinger-Theorie lauten. Wichtig ist, daß die l -Entartung der nichtrelativistischen Theorie auch in der relativistischen Lösung erhalten bleibt. Diese Zusammenhänge werden nochmal in Tabelle 4 erläutert. Wir geben zusätzlich die alte spektroskopische Notation $^{2S+1}L_J$ der Zustände an. Der Wert des Drehimpulses L wird durch die historischen Bezeichnungen S, P, D, \dots für $L = 0, 1, 2, \dots$ ersetzt⁹. Im Wasserstoff mit nur einem Elektron gilt natürlich $L = l$, $S = s$, und $J = j$. Der Index $2S + 1$ wird als Multiplizität bezeichnet, weil er für $L \geq S$ tatsächlich die Multiplizität der Terme mit festem L und S angibt. Der Term mit $n = 1$ wird nicht aufgespalten, das Gleiche gilt für $n = 2$, $l = 0$.

Die stärkste Absenkung für $n > 1$ haben die Terme

$$\begin{aligned}
 2^2S_{1/2}, 2^2P_{1/2} : \Delta W_{\text{FS}} &= \frac{5\alpha^2 R_y}{64} \\
 2^2P_{3/2} : \Delta W_{\text{FS}} &= \frac{\alpha^2 R_y}{64}
 \end{aligned} \tag{266}$$

die Aufspaltung des 2^2P Terms beträgt daher $\alpha^2 R_y/16$, also ein wirklich kleiner Effekt. Zu beachten ist allerdings, daß Atome mit hohem Z , die sich wasserstoffähnlich verhalten, große Feinstruktur-Aufspaltungen zeigen, da dann α^2 in (264) durch $Z^2\alpha^2$ ersetzt wird.

Die erste Linie des Wasserstoffspektrums, die eine Feinstruktur zeigt ist die H_α Linie, die dem Übergang von $n = 3$ nach $n = 2$ entspricht. Die Abb. 46 zeigt die Energieterme und die erlaubten Übergänge. Diese entsprechen den Auswahlregeln

$$|\Delta l| = 1 \quad \Delta j = 0, \pm 1, \tag{267}$$

die wir später begründen werden. Die Dublett- bzw. Tripletstruktur der Terme führt also zu einem Linienmultiplett mit 5 Linien!

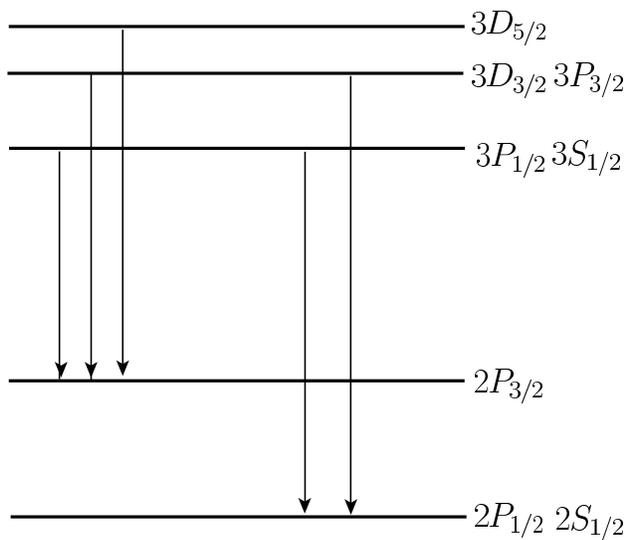


Abbildung 46: Termschema der Feinstruktur für die H_α -Linie im Wasserstoff.

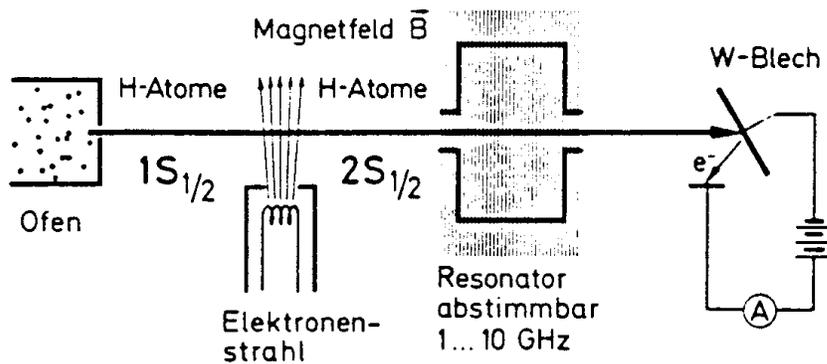


Abbildung 47: Der Versuch von Lamb und Retherford. Aus Haken, Wolf Atom- und Quantenphysik.

4.5 Die Lambshift

In den Jahren 1947 bis 1952 konnten Lamb und Retherford zeigen, daß auch die l -Entartung im Wasserstoff aufgehoben ist (Nobelpreis für W. Lamb 1955). Die dadurch bedingte Aufspaltung der Energieterme ist sehr klein, maximal $4 \cdot 10^{-6}$ eV. Lamb und Retherford benutzten keine optischen Methoden, sondern die in Abb. 47 dargestellte Mikrowellen-Apparatur. Der aus dem Ofen austretende Strahl von H-Atomen durchquert einen Elektronenstrahl. Durch inelastische Stöße wird ein kleiner Teil der Atome angeregt, z.B. in die möglichen Zustände mit $n = 2$, $\Delta W = R_y/4$. H-Atome im Zustand $2^2P_{1/2}$ und $2^2P_{3/2}$ gehen wegen der Auswahlregel

⁹Vorsicht! In der Spektroskopie wird also S als Bezeichnung für die Spinquantenzahl und als Symbol für $L = 0$ munter nebeneinander verwendet!

$\Delta l = 1$ für optische Übergänge sofort in den Grundzustand über. Der Zustand $2^2S_{1/2}$ kann dies nicht, er ist metastabil. Auf dem Wolframblech des Detektors geben die angeregten Atome sehr leicht das Elektron ab und es wird ein Strom gemessen, der proportional zur Anzahl der auftreffenden angeregten Atome ist. Im Resonator können durch Einstrahlung von Mikrowellen ($f = 1..10$ GHz) Übergänge in die $2P$ -Zustände induziert werden, die dann sofort in den Grundzustand übergehen. Wenn die Resonanzfrequenz erreicht wird, sinkt der Strom im Detektor ab, da H Atome im Grundzustand eine hohe Elektronenaffinität haben. Die Experimentatoren fanden eine starke Abnahme bei einer Einstrahlung von ca. 10 GHz, was nur grob der berechneten Feinstrukturaufspaltung entspricht. Zusätzlich gibt es aber eine Abnahme bei 1059 MHz, d.h. der $2^2S_{1/2}$ -Zustand ist $4.37 \cdot 10^{-6}$ eV von einem anderen Zustand entfernt. Es ist der $2^2P_{1/2}$ -Zustand (Abb. 48).

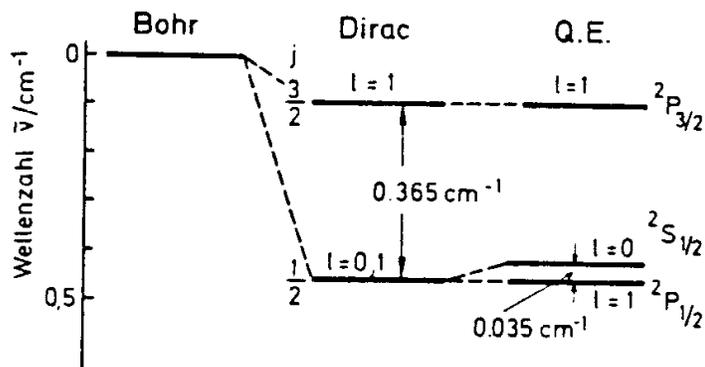


Abbildung 48: Die Aufspaltung und Verschiebung der Feinstrukturterme mit $n = 2$ in der QED. Aus Haken, Wolf Atom- und Quantenphysik.

Diese Aufhebung der l -Entartung kann nur in der Quantenelektrodynamik (QED) richtig beschrieben werden. Die Schrödingergleichung der nichtrelativistischen und die Diracgleichung der relativistischen Quantenmechanik erlauben die Berechnung von Zuständen eines Einteilchen-Systems. Prozesse, wie die Absorption und Emission von Photonen können nur mit zusätzlichen Annahmen behandelt werden. Darauf werden wir später zurückkommen. In der QED als Teil der Quantenfeldtheorie ist die Teilchenzahl keine Konstante, Teilchen können erzeugt und vernichtet werden. Neben der Emission und Absorption von Photonen kann also auch z.B. die Erzeugung und Vernichtung (Zerstrahlung) von Elektron-Positron-Paaren berechnet werden.

Für Streuprozesse wurde in der QED eine sehr mächtige Bildersprache – die Feynmangraphen – entwickelt. Über die Visualisierung hinaus beinhalten sie Rechenregeln, mit deren Hilfe die quantenmechanische Amplitude des Prozesses berechnet werden kann. Die Abb. 49a zeigt den Graphen für die Streuung eines Elektrons im Coulomb-Potential, das hier durch das Kreuz angedeutet wird. Die Emission eines Photons (Bremsstrahlung) wird in Abb. 49b gezeigt. Eine Emission (oder Absorption) von Photonen durch freie Elektronen (Abb. 49c) ist nicht möglich, da der Energiesatz

$$W = W' + W_\gamma \quad (268)$$

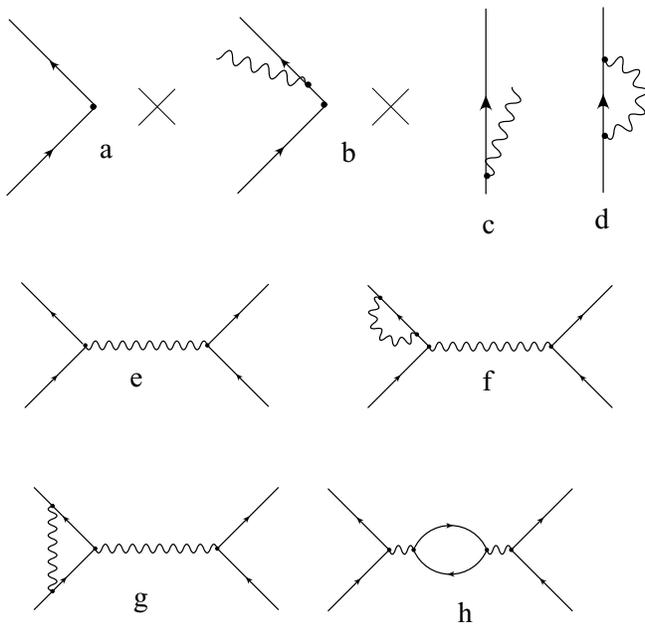


Abbildung 49: Feynmangraphen der Elektronenstreuung.

verletzt wird. Als einfachstes Beispiel berechnen wir die kollineare Abstrahlung eines Photons. Die Energien der Elektronen ersetzen wir durch ihre Impulse und erhalten für die Energiedifferenz zwischen Anfangs- und Endzustand

$$\Delta W = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - \sqrt{p'^2 c^2 + m^2 c^4} - W_\gamma . \quad (269)$$

Nun entwickeln wir die Wurzel für große p, p'

$$\Delta W = pc + \frac{m^2 c^3}{2p} - p'c - \frac{m^2 c^3}{2p'} - W_\gamma . \quad (270)$$

Der Impulssatz gibt aber $p = p' + W_\gamma/c$ also ist

$$\Delta W = \frac{m^2 c^3}{2p} - \frac{m^2 c^3}{2p'} \approx \frac{W_{0,e}^2 W_\gamma}{2W^2} \quad (271)$$

die angenäherte Verletzung des Energiesatzes. In der Quantenmechanik ist eine solche Verletzung jedoch für die Zeitspanne $\Delta t = \hbar/\Delta W$ erlaubt. Daher sind Prozesse wie in Abb. 49d, bei denen das emittierte Photon nach kurzer Zeit wieder absorbiert wird, möglich. Diese Graphen beschreiben typisch die Wechselwirkung eines Elektrons mit seinem Strahlungsfeld und führen zur Formel (36).

Photonen, die den Energiesatz nicht erfüllen, nennt man virtuelle Photonen. Mit ihrer Hilfe kann man zunächst einmal die Potentialstreuung selbst (oder die Elektron Proton Streuung) als Austausch virtueller Photonen verstehen (Abb. 49e). Die Graphen der Selbstenergie, Vertextkorrektur und Vakuumpolarisation (Abb. 49f-h) sind dann Korrekturen höherer Ordnung zum Graphen der Streuung.

Für gebundene Systeme werden die Feynmangraphen nicht verwendet, die physikalischen Zusammenhänge bleiben aber gleich. Die schwierige Rechnung der QED-Korrektur der Energiewerte ergibt für den Zustand $2^2 S_{1/2}$ eine Anhebung der Energie um

$$\Delta W_{\text{Lamb}} = \frac{\alpha^3 R_y}{3\pi} \left(\ln \frac{1}{16.639\alpha^2} + \frac{19}{30} \right) , \quad (272)$$

was einer Frequenz von 1039.31 MHz entspricht. Die P -Terme werden ein wenig angehoben, die numerische Korrektur ist aber nur etwa 1% von (272) und das Gesamtergebnis der sog. *Lambshift* lautet

$$\Delta f(2^2 S_{1/2} - 2^2 P_{1/2}) = 1052.19 \text{ MHz} . \quad (273)$$

Der Hauptbeitrag hierzu kommt von der sog. Vertexkorrektur ((Abb. 49e)). Die physikalisch besonders interessante Vakuumpolarisation trägt nur 27 MHz bei. Die Vakuumpolarisation ist prinzipiell wichtig, da sie zeigt, daß die Quantenfluktuationen des Vakuums (des Zustands ohne Materie) einen meßbaren Effekt haben. Das elektrische Feld erzeugt kurzlebige Elektron-Positron-Paare. Die durch eine Wolke von Elektron-Positron-Paaren bewirkte Abschirmung der Ladung des Kerns im Spektrum des Wasserstoffatoms trägt etwa 2.7% zu (273) bei.

Rechnungen und Messungen sind ständig verfeinert worden. Die Übereinstimmung der Messung mit der theoretischen Vorhersage ist überwältigend. Die Feinstruktur des Wasserstoffspektrums diente daher zu einer genauen Bestimmung von α . Der beste Wert ist heute $1/\alpha = 137.03599976$ mit einer Unsicherheit von 50 in den letzten beiden Stellen.