

FERIENKURS EXPERIMENTALPHYSIK

Hannah Schamoni, Susanne Goerke

Vorlesung 2 am 3.9.2013

Inhaltsverzeichnis

1	Struktur der Atome	2
2	Das Einelektronensystem	3
2.1	Die Schrödinger-Gleichung für das Einelektronensystem	3
2.2	Lösung der Radialwellengleichung	4
2.3	Entartung	5
2.4	Die Gesamtwellenfunktion	5
2.5	Der Normale Zeeman-Effekt	6
2.6	Vergleich der Schrödinger-Theorie mit Experimenten	7
2.7	Relativistische Korrekturen	7
2.7.1	Relativistische Kinetische Energie	7
2.7.2	Spin-Bahn-Kopplung	7
2.7.3	Darwin-Term	9
2.8	Die Feinstruktur des Wasserstoffatoms	9
2.9	Der Anomale Zeeman-Effekt	9
2.10	Der Paschen-Back-Effekt	10
2.11	Die Hyperfeinstruktur	10
2.12	Vollständige Beschreibung des Wasserstoffatoms	12

1 Struktur der Atome

Wie sind Atome aufgebaut? Ein Ergebnis von Rutherfords Streuexperimenten war, dass die Ladungsträger in Atomen nicht, wie in Thomsons Atommodell einem Rosinenbrötchen verteilt sind, sondern ein positiv geladener Kern existieren muss. Aus diesem Grund modifizierte Rutherford dieses Atommodell und fügte einen positiv geladenen Kern ein. Die Elektronen seien trotzdem in einer diffusen Hülle um den Kern verteilt. Damit waren aber nicht das Erscheinen von Absorptionslinien in den Spektren erklärt. Wie sollten definierte Frequenzen absorbiert werden, wenn die Elektronen diffus verteilt werden.

Vor 100 Jahren (1913) wurde von Bohr ein neues Atommodell vorgeschlagen. Die Hypothese Bohrs war, dass die Elektronen um den Kern wie die Planeten um die Sonne kreisen. Damit lies sich die Existenz der Absorption- bzw. Emissionsspektren von Wasserstoff erklären. Bestimmte Frequenzen würden so absorbiert werden.

Im sichtbaren Bereich des Wasserstoffspektrums liegt die Balmer-Serie. Diese wurde empirisch entdeckt und ein mathematischer Zusammenhang beschreibt die verschiedenen Wellenlängen, wobei bei der Balmer-Serie $m = 2$ gilt.

$$\nu_{n \rightarrow m} = R_H \cdot c_0 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1)$$

R_H Rydberg-Konstante, c_0 Lichtgeschwindigkeit, m und n Orbitale Ionisationsenergie des Wasserstoffatoms

Bohrsches Atommodell ist das erste Atommodell, das eine Quantisierung einschloss. Die Annahme von der Bewegung der Elektronen liegt darin, dass sich die Elektronen mit einer bestimmten Geschwindigkeit v in einem Radius r um den Kern bewegen. Mit einem einfachen Kraftansatz, bei dem die Elektronen von der elektrostatischen Anziehung (Coulomb-Potential) auf der Kreisbahn gehalten wird:

$$\frac{\mu v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} \quad (2)$$

wobei hier die reduzierte Masse $\mu = \frac{m_e \cdot m_k}{m_e + m_k}$ berücksichtigt wird. Aus einem Schwerpunktsystem von Elektron- und Kernmasse m_e bzw. m_k . Somit ist der Radius des Orbitals

$$r = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\mu v^2} \quad (3)$$

Die Bedingung für die Frequenz bildet eine Quantisierung, die eine stehende Welle annimmt. Somit gilt

$$2\pi r = n\lambda_B \quad (4)$$

Und daraus ergibt sich mit der de-Broglie Wellenlänge $\lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{h}{\mu v}$ der Radius

$$r = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\mu} \frac{(2\pi\mu r^2)^2}{n^2\hbar^2} = n^2 \frac{\hbar^2\epsilon_0}{\pi\mu} Ze^2 = n^2 \frac{a_0}{Z} \quad (5)$$

Der Bohrsche Atomradius a_0 wird nun als derjenige Radius bezeichnet, der den kleinsten Abstand ($n=1$) im Wasserstoffatom ($Z=1$) beschreibt. Dieser Radius wird häufig als Konstante bei Rechnungen eingeführt und um grobe Abschätzungen durchzuführen.

$$a_0 = \frac{\epsilon_0\hbar^2}{\pi\mu e^2} = 5.2911 \cdot 10^{-11} m \approx 0.5\text{\AA} \quad (6)$$

Geht man damit zurück zu der Energiebetrachtung, erhält man die Ionisationsenergie, die auch für Eielektronensysteme mit höheren Massenzahlen gilt

$$E_n = -R_H^* \frac{Z^2}{n^2} \quad (7)$$

wobei hier R_H^* die Rydberg-Konstante die reduzierte Masse berücksichtigt ist. Ein wichtiger Zahlenwert ist die Ionisierungsenergie des Wasserstoffatoms mit 13.59 eV.

Das Bohrsche Atommodell ist semiklassisch und liefert Ergebnisse, die in der richtigen Größenordnung und auf die vierte Nachkommastelle genau sind.

2 Das Eielektronensystem

Die exakte Beschreibung des Eielektronensystems benötigt einen quantenmechanischen Ansatz. Das Wasserstoffatom sowie wasserstoffähnliche Systeme können exakt in dieser Theorie gelöst werden.

2.1 Die Schrödinger-Gleichung für das Eielektronensystem

Der allgemeine Ansatz ist die Schrödingergleichung, in der die Bewegungsenergie des Kerns und des Elektrons sowie das Potential, erzeugt durch die unterschiedliche Ladungen der beiden, einfließen.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_K} \Delta_K \Psi - \frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_e \Psi - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_K - \vec{r}_e|} \Psi = E \Psi(\vec{r}_K, \vec{r}_e) \quad (8)$$

Diese Schrödingergleichung hat sechs unabhängige Ortskoordinaten und wird in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten überführt. Dabei entstehen keine Mischterme. Die Schwerpunktskoordinaten bleiben nur bei dem kinetischen Energieterm und beschreibt eine Translationsbewegung. So wird es möglich,

die Schrödingergleichung auf die Relativbewegung von Kern und Elektron zu reduzieren und somit das Problem auf drei Ortsvariablen zu beschränken:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi + E_{pot}(r)\Psi = E\Psi \quad (9)$$

wobei die potentielle Energie (das Coulomb-Potential) nur vom Abstand $r = |\vec{r}|$ des Kerns vom Elektron abhängt.

$$\left[-\frac{\hbar}{2\mu} \cdot \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{1}{2\mu r^2} \hat{L}^2 \right] \Psi(\vec{r}) = E_r \Psi(\vec{r}) \quad (10)$$

Hier wurde der Laplace-Operator bereits in Kugelkoordinaten ausgedrückt und der Drehimpuls eingeführt. Die exakte Lösung der Gleichung ist nicht trivial. Der Ansatz jedoch, ist die klassische Vorgehensweise bei einer Differentialgleichung wie dieser. Der Separationsansatz bietet die Möglichkeit, die komplizierte Gleichung in zwei kompaktere Gleichungen aufzuteilen. Es wird eine Gesamtwellengleichung der folgenden Form gewählt:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{u(r)}{r} Y_l^m(\theta, \phi) \quad (11)$$

ein Produkt aus einer Radialwellenfunktion und den Kugelflächenfunktionen.

Im folgenden Kapitel wird die Lösung der Radialwellengleichung betrachtet.

2.2 Lösung der Radialwellengleichung

Setzt man Gleichung 11 in die Schrödingergleichung ein, erhält man nach einigem Umstellen

$$\frac{\partial^2 u_n(r)}{\partial r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E_n + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} \right] u_n(r) = 0 \quad (12)$$

Um eine Lösung angeben zu können, muss diese Gleichung umgeformt werden. Dafür wird $\rho = \frac{r}{na_0}$ mit eingeführt.

$$\frac{\partial^2 u_n(\rho)}{\partial \rho^2} - \left(1 - \frac{2n}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) u_n(\rho) = 0 \quad (13)$$

Die Lösung dieser Gleichung ist eine Potentialreihe, die sogenannten zugeordneten Lagrange Polynome.

$$L_{n+l}^{2l+1}(r) \quad (14)$$

Physikalisch sinnvolle Lösungen ergeben sich nur für positive ganzzahlige n . Daraus folgen die Bedingungen für die folgenden Quantenzahlen

- $n = 1, 2, \dots$ die Hauptquantenzahl

- $0 \leq l \leq n - 1$ die Drehimpulsquantenzahl
- $-l \leq m \leq l$ die magnetische Quantenzahl

Die Bedingung für die magnetische Quantenzahl resultiert aus den Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen. (siehe: gestrige Vorlesung)

Die Energieeigenwerte entsprechen den Bohrschen Energiewerten.

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{Z^2}{n^2} \quad (15)$$

2.3 Entartung

Ein entartetes System ist dadurch charakterisiert, das zu einem Energieeigenwert mehr als eine Eigenfunktion existiert.

$$\sum_{l>0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (16)$$

Für eine Wasserstoffatom im Vakuum existieren n^2 verschiedene Eigenfunktionen für einen Energieeigenwert E_n .

2.4 Die Gesamtwellenfunktion

Die Gesamtwellenfunktion, also

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi) \quad (17)$$

ist bestimmt durch die Quantenzahlen n, l, m . Also hängt auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit von diesen Quantenzahlen ab und der Atomzustand ist eindeutig durch die Angabe von n, l, m bestimmt.

Am Beispiel des 1s Zustands ($n = 1, l = 0$) wird nun der Unterschied der Aufenthaltswahrscheinlichkeit und der Erwartungswerts (also der eigentlichen Messgröße) gezeigt.

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

$$W(r)dr = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\Psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi)|^2 r^2 dr \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = r^2 R_{n,l}^2(r) dr \quad (18)$$

$$W_{1s}(r) = a_0$$

Der Erwartungswert $\langle r \rangle$ des 1s Zustands wird nun bestimmt:

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty dr \cdot r |\Psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi)|^2 = \int_0^\infty \frac{r}{\pi a_0^3} 4\pi r^2 e^{-2r/a_0} dr = \frac{3}{2} a_0 \quad (19)$$

Dabei sind die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ so normiert, dass das Integral über den gesamten Raum immer 1 ergibt. Die eigentlich dem Bohrradius entsprechende quantenmechanische Messgröße, der Erwartungswert von r , stimmt nicht mit dem Bohrschen Radius überein.

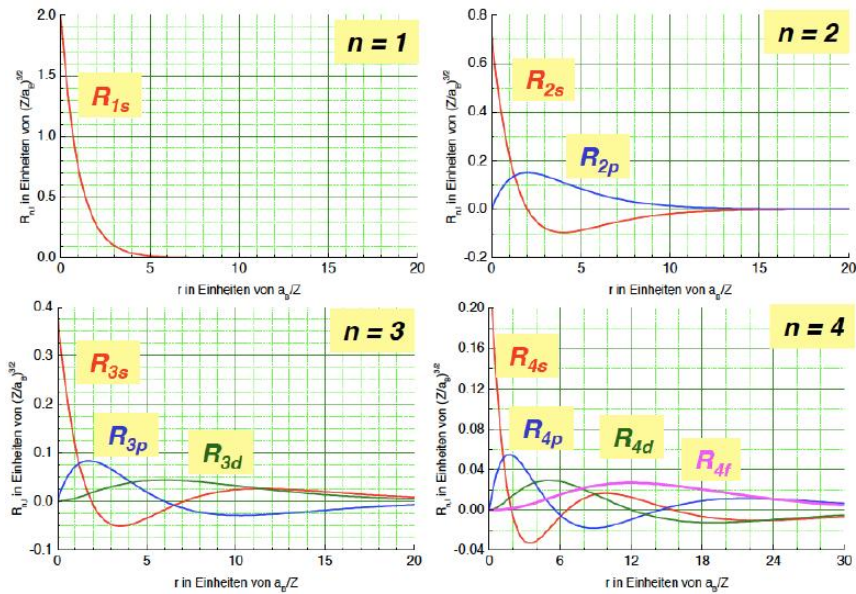


Abbildung 1: Radiale Wellenfunktion des Elektrons im Eielektronensystem (aus Vorlesung, 16.05.13)

2.5 Der Normale Zeeman-Effekt

In den vorhergehenden Kapiteln wurde das Atom im Vakuum ohne elektromagnetische Felder betrachtet- jetzt wird ein externes Magnetfeld eingeführt. Die Beobachtung im Experiment zeigt eine Aufspaltung der bisherigen Linien in $(2l + 1)$ Niveaus. Die Entartung in l wird aufgehoben und für jedes m_l existiert ein Energieeigenwert.

Ein Ansatz, diese Phänomene zu verstehen, ist die klassische Elektrodynamik, die bewegten Ladungen ein Dipolmoment zuordnet. Dieses Dipolmoment erzeugt ein zusätzliches Potential $\Delta E_{pot} = \mu_B m B_z$. Das Magnetfeld zeigt o.B.d.A in die z -Richtung, und $\mu_b = \frac{e\hbar}{2m_e}$ bezeichnet das Bohrsche Magneton.

Die quantenmechanische Beschreibung ordnet der Drehimpulsquantenzahl ein magnetisches Moment zu. Die Erwartungswerte sind:

$$\hat{\mu}_l^2 \psi = g_l^2 \mu_B^2 l(l + 1) \psi \quad (20)$$

$$\hat{\mu}_z \psi = g_l \mu_B^2 m \psi \quad (21)$$

Mit dem Lande-Faktor g_l . Es soll kurz erwähnt werden, dass hier Auswahlregeln für die Übergänge existieren,

$$E_\gamma = \begin{cases} E_0 + \Delta E & \Delta m = -1 \\ E_0 & \Delta m = 0 \\ E_0 - \Delta E & \Delta m = +1 \end{cases} \quad (22)$$

also in Emissionsexperimenten Photonen mit drei verschiedenen Energien beobachtet werden.

2.6 Vergleich der Schrödinger-Theorie mit Experimenten

Ist die Schrödinger-Theorie exakt? Die Beschreibung des Wasserstoffatoms mit Hilfe des Bohrschen Atommodells (und im Umkehrschluss auch die der quantenmechanischen Beschreibung) sagt bis auf die 4. Größenordnung genau die Messergebnisse voraus. Die Wellenzahlen hängen neben n auch von l ab. Es existiert eine Feinstruktur und auch der Grundzustand zeigt eine Struktur.

All diese Phänomene werden in den folgenden Kapiteln geklärt.

2.7 Relativistische Korrekturen

Zunächst werden relativistische Korrekturen betrachtet. Der relativistische Energieansatz wird verwendet, um eine höhere Genauigkeit zu erreichen.

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2 + E_{pot} = m_0 c^2 \sqrt{1 + \frac{p^2}{m_0^2 c^2}} - m_0 c^2 + E_{pot} \quad (23)$$

Die Wurzel wird entwickelt, und so gilt

$$E = \left(\frac{p^2}{2m_0} + E_{pot} \right) - \frac{p^4}{8m_0^3 c^2} + \dots = E_{nichtrel} - \Delta E_{rel} \quad (24)$$

Die Reihenentwicklung kann wegen $E_{kin} \ll m_0 c^2$ abgebrochen werden.

$$\Delta \hat{H}_{rel} = -\frac{\hat{p}^4}{8m_0^3 c^2}$$

ist dann die relativistische Korrektur des Hamilton-Operators.

2.7.1 Relativistische Kinetische Energie

Der Erwartungswert ist

$$\Delta E_{rel} = \langle \Delta \hat{H}_{rel} \rangle = \frac{\hbar^4}{8m_0^3 c^2} \int \Psi_{n,l,m}^* \nabla^4 \Psi_{n,l,m} dV \quad (25)$$

2.7.2 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. Im semiklassischen Modell betrachtet man das Ruhesystem des Elektrons so erzeugt der um das

Elektron kreisende Kern ein Magnetfeld, welches nach Biot-Savart berechnet werden kann:

$$\vec{B}_l = \frac{\mu_0 Z e}{4\pi r^3} (\vec{v} \times (-\vec{r})) = \frac{\mu_0 Z e}{4\pi r^3 m_e} \vec{L} \quad (26)$$

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

$$\Delta E_{LS} = -\mu_s \cdot \vec{B}_l = \frac{g_s \mu_B}{\hbar} (\vec{S} \cdot \vec{B}_l) \quad (27)$$

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

$$\Delta \hat{H}_{LS} = g_s \mu_B \frac{\mu_0 Z e}{4\pi r^3 m_e \hbar} (\hat{S} \cdot \hat{L}) \approx \frac{\mu_0 Z e^2}{4\pi r^3 m_e^2} (\hat{S} \cdot \hat{L}) \quad (28)$$

und für den Energieeigenwert der Korrektur

$$\Delta E_{LS} = \langle \Delta \hat{H}_{LS} \rangle \approx \frac{\mu_0 Z e^2}{4\pi r^3 m_e^2} \langle \hat{S} \cdot \hat{L} \rangle \quad (29)$$

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

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{H}] &\sim [\hat{L}_z, (\hat{L} \cdot \hat{S})] = [\hat{L}_z, (\hat{L}_x \cdot \hat{S}_x + \hat{L}_y \cdot \hat{S}_y + \hat{L}_z \cdot \hat{S}_z)] \\ &= i\hbar [(\hat{L}_y \cdot \hat{S}_x + \hat{L}_x \cdot \hat{S}_y)] \neq 0 \end{aligned} \quad (30)$$

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, kann man beide zu einem Gesamtdrehimpuls \vec{J} zusammenfassen:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (31)$$

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

$$|\vec{J}| = \sqrt{j(j+1)}\hbar \quad (32)$$

$$\hat{J}_z = m_j \hbar \quad (33)$$

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.

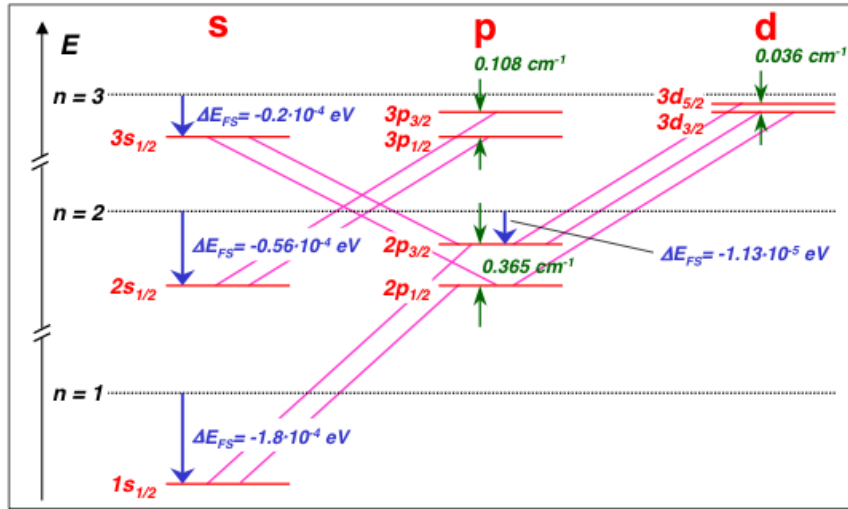


Abbildung 2: Termschema des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung der relativistischen Korrektur und der Spin-Bahn-Kopplung (aus Gross, Experimentalphysik 4, S. 146)

2.7.3 Darwin-Term

$$\Delta E_{rel} = E_n \left[\frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{l}{l+1/2} \right) + O(\alpha^3) \right] \quad (34)$$

Es ergibt sich insgesamt der Ausdruck für alle drei relativistische Korrekturen

$$\langle \Delta E_{FS} \rangle_{n,j} = E_n \left[\frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j+1} \right) + O(\alpha^3) \right] \quad (35)$$

2.8 Die Feinstruktur des Wasserstoffatoms

Die Kombination aller relativistischen Effekte erklärt die beobachtete Feinstruktur.

$$\langle \Delta E_{FS} \rangle_{n,j} = E_n \left[1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j+1/2} \right) \right] \quad (36)$$

2.9 Der Anomale Zeeman-Effekt

Im Gegensatz zum normalen Zeeman-Effekt, der die Wechselwirkung des magnetischen Moments, induziert durch ein äußeres magnetisches Feld beschreibt, berücksichtigt der anomale Zeeman-Effekt die Wechselwirkungen, die durch den Elektron-Spin entstehen.

So ist das magnetische Moment

$$\vec{\mu}_j = -\frac{\mu_B}{\hbar} (g_l \cdot \vec{l} + g_s \cdot \vec{s}) = -\frac{\mu_B}{\hbar} (\vec{j} + \vec{s}) \quad (37)$$

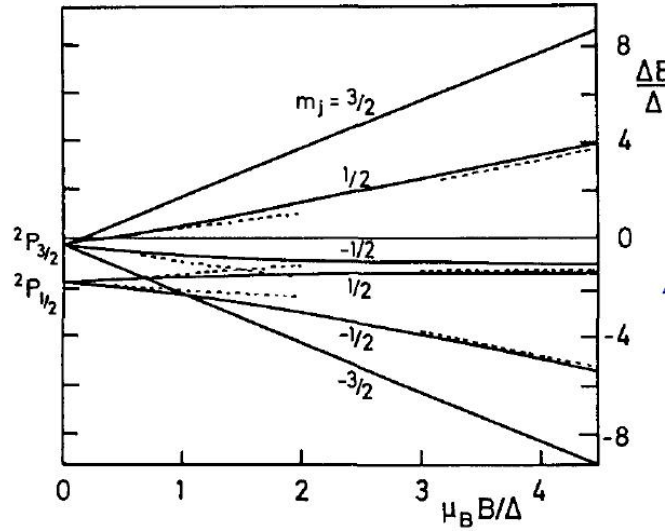


Abbildung 3: Übergang Zeemann \rightarrow Paschen-Back-Effekt (aus Schwabl

und die Projektion auf die z-Achse ist

$$\langle \vec{\mu}_j \rangle = -g_j \sqrt{j(j+1)} \mu_B \quad (38)$$

mit dem Lande-Faktor

$$g_j = 1 + \frac{(j(j+1) + s(s+1) - l(l+1))}{2j(j+1)} \quad (39)$$

Führt man wiederum ein externes Magnetfeld B ein, präzediert \vec{j} nun um B und nimmt die Projektion des Gesamtspins quantisierte Werte an: $j_z = m_j \hbar$; wobei $-j \leq m_j \leq j$. Diese Bewegung erzeugt eine zusätzliche Energie

$$E_{m_j} = -\langle \mu_j \rangle_z \cdot B = m_j g_j \mu_B \quad (40)$$

Die Aufspaltung ist also direkt proportional zum angelegten Magnetfeld.

2.10 Der Paschen-Back-Effekt

Der Paschen-Back-Effekt beschreibt die Aufspaltung der Energieniveaus in starken Magnetfeldern. Es sind \vec{l} und \vec{s} Entkoppelt und präzedieren beide im externen Magnetfeld. So ist hier auch der Gesamtdrehimpuls nicht mehr definiert.

2.11 Die Hyperfeinstruktur

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

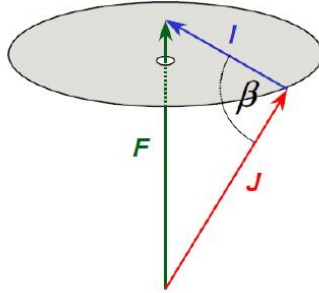


Abbildung 4: Kopplung des magnetischen Moments des Kerns mit dem Magnetfeld der Hülle (aus Gross, Experimentalphysik 4)

Quantenregeln

$$|\vec{I}| = \sqrt{i(i+1)}\hbar \quad (41)$$

$$\hat{I}_z = m_i\hbar \quad (42)$$

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

$$\vec{\mu}_i = g_i\mu_K \frac{\vec{I}}{\hbar} \quad (43)$$

$$\mu_{i,z} = g_i\mu_K m_i \quad (44)$$

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

$$\Delta E_{HFS} = -\vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_j = -|\vec{\mu}_i||\vec{B}_j| \cos(\angle(\vec{J}, \vec{I})) \quad (45)$$

Dabei kann der cos 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

$$\cos(\angle(\vec{J}, \vec{I})) = \frac{\vec{J} \cdot \vec{I}}{|\vec{J}||\vec{I}|} = \frac{1}{2} \frac{f(f+1) - j(j+1) - i(i+1)}{\sqrt{j(j+1)}\sqrt{i(i+1)}} \quad (46)$$

Wieder analog ergibt sich nun die Hyperfeinenergie des Wasserstoffatoms zu

$$E_{HFS} = E_{n,l,j} + \Delta E_{LS} = E_{n,l,j} + \frac{\lambda_{JI}}{2} [f(f+1) - j(j+1) - i(i+1)] \quad (47)$$

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

$$E_{HFS}(f = 1) = E_{1,0,1/2} + \frac{\lambda_{IJ}}{4} \quad (48)$$

$$E_{HFS}(f = 0) = E_{1,0,1/2} - \frac{3\lambda_{IJ}}{4} \quad (49)$$

2.12 Vollständige Beschreibung des Wasserstoffatoms

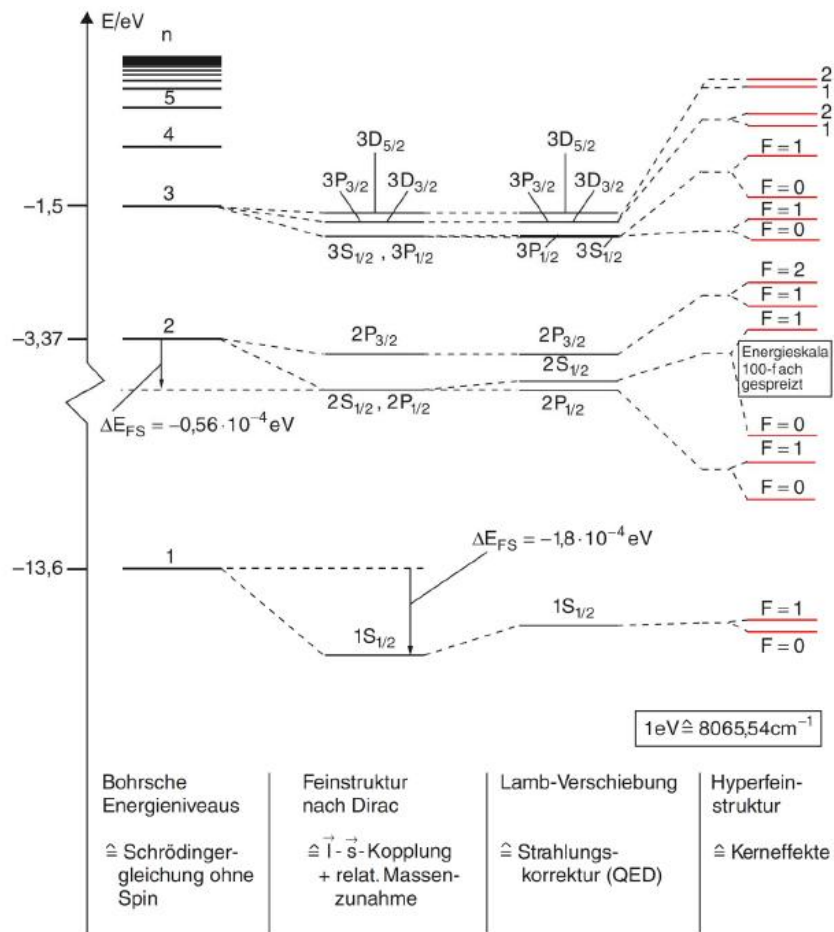


Abbildung 5: Vollständige Beschreibung des Wasserstoffatoms