

TEIL 10

Nachdenken/Nachlesen:

Was sind myonische Atome/Moleküle ? Wie groß sind sie ? Inwiefern könnten sie möglicherweise zur Kernfusion eingesetzt werden ?

11. Feinstruktur und Hyperfeinstruktur

Nachdem wir den Aufbau der Atome grob verstanden haben, wenden wir uns noch einmal den Details zu.

Die Energieniveaus in Atomen kann man als Reihenentwicklung in der Feinstrukturkonstanten darstellen und zB. mit der Störungsrechnung bestimmen:

$$E_e = m_e c^2 \cdot (A_e \alpha^2 + B_e \alpha^3 + C_e \alpha^4 + \dots) \quad (1)$$

A_e, B_e, \dots sind dimensionslose Faktoren und typisch von der Größenordnung 1. Die Energieskala ist also an die Elektronmasse geknüpft! Der Term proportional zu A_e gibt die niedrigste Ordnung an. Im Wasserstoffatom gilt $A_e = -1/2$. Der Koeffizient B_e verschwindet und die durch C_e gegebene Linienaufspaltung bezeichnet man als Feinstruktur. Im obigen Ausdruck ist der Kern noch nicht berücksichtigt; dessen (magnetische) Wechselwirkung mit den Elektronen bewirkt die Hyperfeinstruktur:

$$E = E_e + E_K = E_e + \frac{m_e}{m_p} \cdot m_e c^2 \cdot (C_K \alpha^4 + \dots) \quad (2)$$

Wegen des Massenverhältnisses $m_e/m_p \sim \mu_K/\mu_B$ der Größenordnung 10^{-3} ist die Aufspaltung entsprechend kleiner als die Feinstruktur.

Die folgende Diskussion ist auf das Wasserstoffatom fokussiert, da es einfacher zu verstehen ist als komplexe Atome. Äußere Felder seien nicht vorhanden.

11.1. Feinstruktur

Den Kern betrachten wir zunächst wieder als einen schweren Massenpunkt mit Ladung $Z e$ und vernachlässigen seinen Spin und sein magnetisches Moment.

Die zwei zu C_e beitragenden Phänomene sind die Spin-Bahn-Kopplung und relativistische Korrekturen.

11.1.1. Spin-Bahn-Kopplung

Siehe Kapitel 9.4!

Ergebnis, für Wasserstoff:

$$\Delta E_{SB} = \frac{e^2 c^2}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 r^3} \cdot \vec{S} \cdot \vec{L} \sim m_e c^2 \alpha^4 \quad (3)$$

Die genaue Rechnung, incl. Berechnung des Erwartungswertes

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \int \psi_{n,l,m}^* \frac{1}{r^3} \psi_{n,l,m} d^3\vec{r} \quad (4)$$

ergibt:

$$\Delta E_{SB} = \alpha^4 m_e c^2 \cdot \frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{4 n^3 l(l+1/2)(l+1)} \quad l > 0 \quad (5)$$

Das ist die Differenz zum Energieterm E_n . Den Zähler erkennen wir wieder aus Kapitel 9.4 (wobei $s(s+1) = 3/4$), der Nenner folgt aus der Berechnung von $\langle 1/r^3 \rangle$ als Funktion der Quantenzahlen der eingesetzten Wellenfunktion.

11.1.2. Relativistische Korrektur

Semiklassisch kann man die Elektrongeschwindigkeit aus der kinetischen Energie abschätzen; im Grundzustand:

$$\frac{v}{c} = \sqrt{\frac{2 E_{kin}}{m_e c^2}} = \alpha = O(1\%) \quad (6)$$

Das bedeutet, dass die nichtrelativistische Näherung einen vernünftigen ersten Ansatz darstellt, aber die relativistischen Korrekturen sind bei guter Messgenauigkeit der Spektrallinien durchaus 'sichtbar'.

Der Operator für die kinetische Energie ist im relativistischen Fall durch die Reihenentwicklung

$$\sqrt{p^2 c^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2 = \frac{p^2}{2 m_e} - \frac{p^4}{8 m_e^3 c^2} \cdots \rightarrow \frac{\hat{p}^2}{2 m_e} - \frac{\hat{p}^4}{8 m_e^3 c^2} \cdots \quad (7)$$

gegeben. Beachte: Es treten nur gerade Potenzen von p (und damit auch von α) auf! Da die Korrektur klein ist (s.o.) wird die Reihe schnell konvergieren. Die Energieverschiebung aufgrund des ersten Korrekturtermes kann man für den Wasserstoffgrundzustand per Störungsrechnung bestimmen:

$$\Delta E = - \int \psi^* \frac{\hat{p}^4}{8 m_e^3 c^2} \psi dV \quad (8)$$

Die Rechnung ist etwas aufwendiger, aber die Größenordnung und das Vorzeichen können wir sofort angeben:

$$\frac{p^2}{2m_e} \sim m_e c^2 \alpha^2 \quad (9)$$

Also

$$\Delta E_{rel} \sim -m_e c^2 \alpha^4 \quad (10)$$

Das ist die gleiche Potenz von α wie bei der Spin-Bahn-Kopplung.

Genauere Rechnung liefert (in der Ordnung α^4):

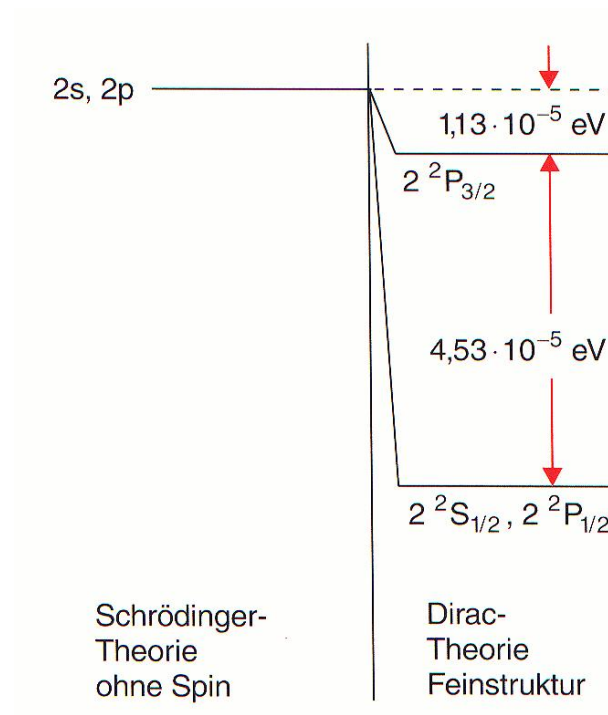
$$\Delta E_{rel} = -\alpha^4 m_e c^2 \cdot \frac{1}{2n^4} \cdot \left[\frac{n}{l + 1/2} - \frac{3}{4} \right] \quad (11)$$

Dieser Wert hängt also neben n nur von der Bahndrehimpulsquantenzahl l , also nur der Bahnbewegung ab - das ist plausibel.

Fasst man nun beide Effekte zusammen durch Addition von (5) und (11), bekommt man (Übung):

$$\Delta E_{FS} = -\alpha^4 m_e c^2 \cdot \frac{1}{2n^4} \cdot \left[\frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{4} \right] \quad (12)$$

Die Feinstrukturaufspaltung hängt also bei festem n nur von $j = 1/2, 3/2 \dots n - 1/2$ ab, und es gibt eine Aufspaltung in n nicht-äquidistante Linien, siehe Termschema



Beispiel:

Wasserstoff mit $n = 2, l = 1$:

j	ΔE_{SB}	ΔE_{rel}	ΔE_{FS}
1/2	$-1/8 \cdot 1/6 \cdot E_0$	$-1/16 \cdot 7/24 \cdot E_0$	$-1/16 \cdot 5/8 \cdot E_0 = -5.7 \cdot 10^{-5} \cdot eV$
3/2	$+1/8 \cdot 1/12 \cdot E_0$	$-1/16 \cdot 7/24 \cdot E_0$	$-1/16 \cdot 1/8 \cdot E_0 = -1.1 \cdot 10^{-5} \cdot eV$

wobei $E_0 = \alpha^4 m_e c^2 = 1.45 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$. Der erste Faktor in der Tabelle ist $1/n^3$ bzw. $1/n^4$.

Die Aufspaltung $P_{3/2} - P_{1/2}$ beträgt also:

$$\Delta E_{FS}(P_{3/2}) - \Delta E_{FS}(P_{1/2}) = \frac{1}{32} E_0 = 4.5 \cdot 10^{-5} \text{ eV} \quad (13)$$

Unter Berücksichtigung nur der Spin-Bahn-Kopplung (siehe auch Kapitel 9) ergibt sich exakt die gleiche Doppel-Differenz, obwohl die Verschiebungen ΔE selbst unterschiedlich sind, also z.B. $\Delta E_{FS}(P_{1/2}) \neq \Delta E_{SB}(P_{1/2})$.

Statt mit der nichtrelativistischen Schrödingergleichung kann man das Wasserstoffatom auch mit der relativistischen Dirac-Gleichung berechnen, in der auch der Elektronspin schon eingebaut ist (\rightarrow Quantentheorie II). Hier erhält man gleich das Gesamtergebnis (12), scheinbar haben beide Phänomene (Spin-Bahn- + Relativistische Korrektur) die gleiche Wurzel.

11.2. Lamb-Shift

Die Lamb-Verschiebung oder Lamb-Shift ist eine weitere Aufspaltung der Spektrallinien, der Ordnung α^5 , die mit den bisher diskutierten Effekten nichts zu tun hat:

$$\Delta E_{Lamb} \sim m_e c^2 \alpha^5 \quad (14)$$

Da die auftretenden Energiedifferenzen so klein sind ($\sim 10^{-6} \text{ eV}$), findet man die Übergänge im Mikrowellenbereich ($\sim 1 \text{ GHz}$). So wurden sie 1947 von W.E. Lamb (Nobelpreis 1955) und R.C. Retherford entdeckt, und zwar zwischen den Wasserstoffzuständen $^2 S_{1/2}$ und $^2 P_{1/2}$, die 'eigentlich' entartet sein sollten (auch unter Berücksichtigung der Feinstruktur (s.o.), da j in beiden Fällen gleich ist!). Zu den Messungen siehe Abschnitt 11.4.

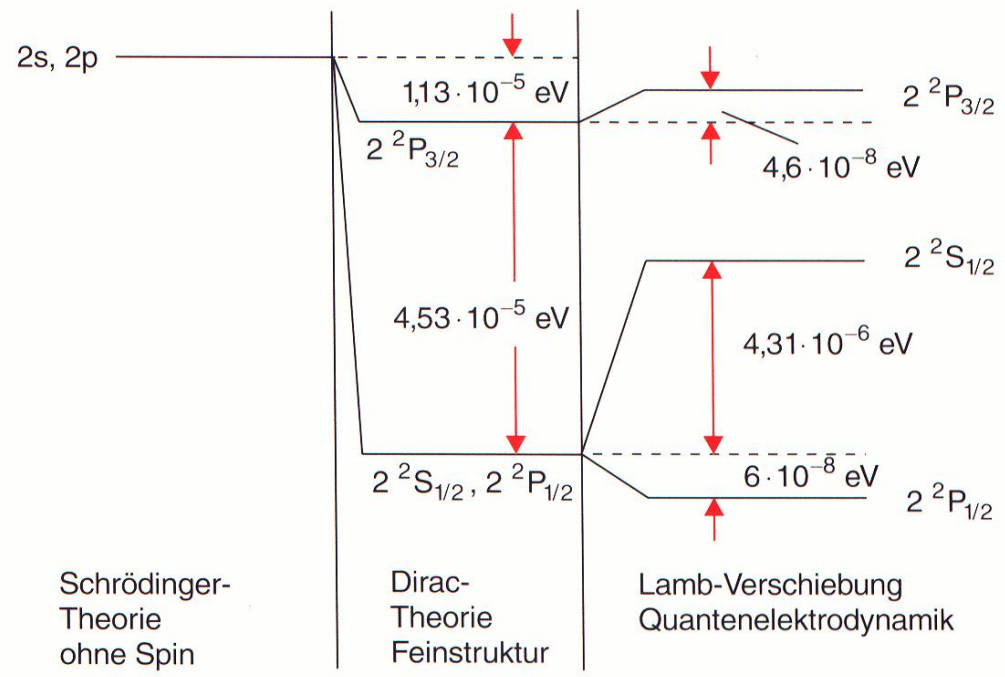
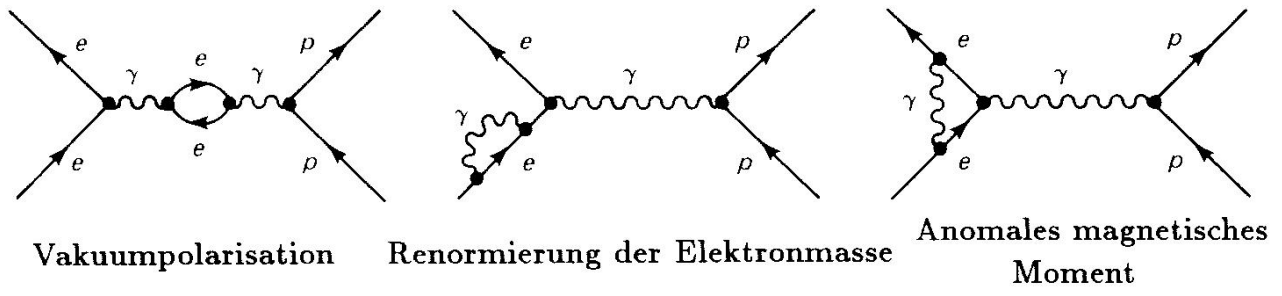
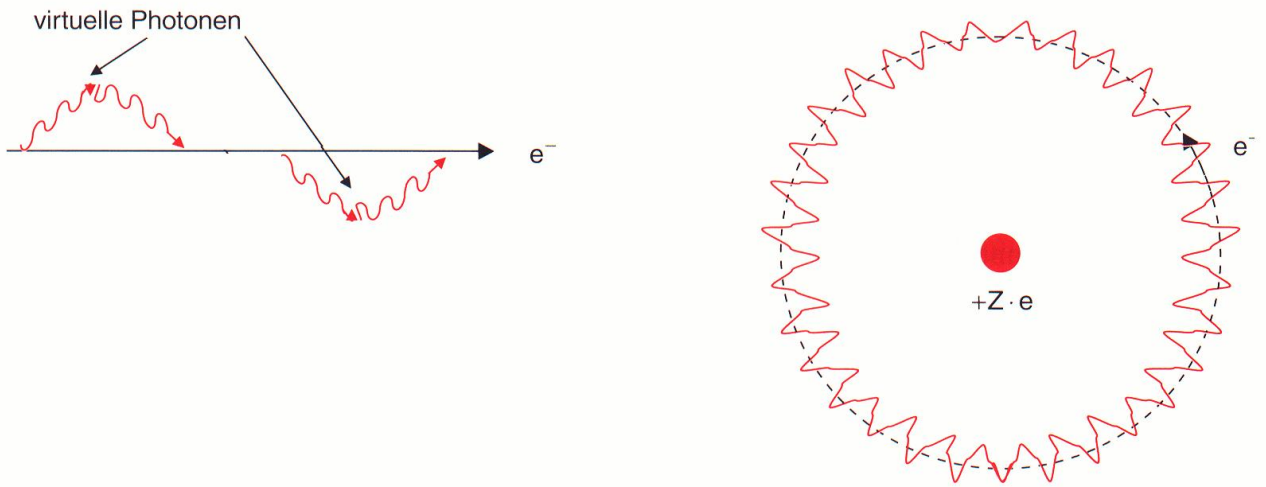
Eine erste qualitative Erklärung wurde von H. Bethe gegeben, später konnte die neue Theorie der Quantenelektrodynamik die Beobachtungen quantitativ sehr gut beschreiben. Das elektrische Feld ist ersetzt durch Photonen, die zwischen Elektron und Kern ausgetauscht werden (in der Skizze nicht eingetragen). In dieser Theorie können für kurze Zeiten (in Einklang mit der Heisenbergschen Unschärferelation) virtuelle Teilchen, hier Photonen, abgestrahlt und dann wieder reabsorbiert werden. Das führt zu einer Zitterbewegung der Elektronen und zu einer kleinen Energieverschiebung, siehe Skizze.

Heute stellen wir diese Wechselwirkungen durch Feynman-Graphen dar, die Richard P. Feynman einführte: Im ersten Graphen ist auch die Vakuumpolarisation zu sehen: ein Photon spaltet kurzzeitig in Elektron und Positron auf. Dieser Beitrag ist zwar sehr klein (3% der Lamb-Shift im $2 S$ -Zustand), kann aber durchaus gemessen werden. Indirekt bestätigen also die Präzisionsmessungen¹ am Wasserstoffatom die Existenz des Antiteilchens Positron!

Die Lamb-Shift ist besonders dann groß, wenn das Potential stark mit dem Ort variiert, also in Kernnähe. Bei großem n und/oder großem l ist der Effekt dagegen klein.

Sowohl Feinstrukturaufspaltung als auch Lamb-Shift wachsen mit Z^4 . So hat man in (fast) vollständig ionisiertem Uran eine Lamb-Shift von fast 500 eV gemessen.

¹Allgemeines wichtiges Prinzip: Genaue Messungen an bekannten Objekten \rightarrow indirekte Hinweise auf neue Physik! Beispiele: gestörte Planetenbahnen \rightarrow Neptun, e^+e^- -Wechselwirkungen bei 'mittlerer' Energie \rightarrow Top-Quark



11.3. Hyperfeinstruktur

Den Kernspin bezeichnen wir mit \vec{I} , die zugehörige magnetische Quantenzahl mit m_I . Im Wasserstoffatom (Proton) gibt es die beiden möglichen Werte $m_I = \pm 1/2$. Durch Wechselwirkung des Kernmomentes $\vec{\mu}_I$ mit denen der Hülle (Bahnbewegung plus Spin) gibt es eine kleine Energieaufspaltung je nach relativer Orientierung von Gesamtdrehimpuls \vec{j} der Hülle und Kernspin \vec{I} , die Hyperfeinstruktur. Größenordnung:

$$\Delta E_{HFS} \sim \frac{m_e}{m_p} \cdot m_e c^2 \alpha^4 \quad (15)$$

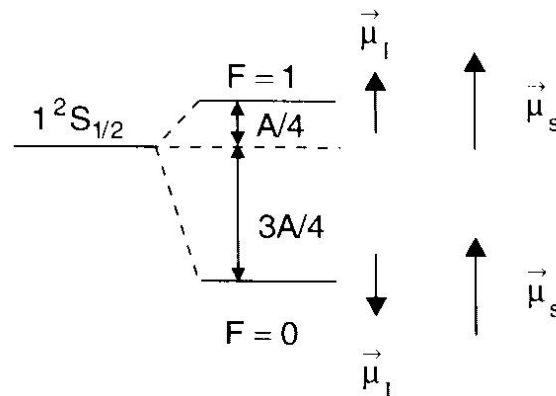
Das am Kernort erzeugte Magnetfeld ist dabei sehr stark, von der Größenordnung 100 T. \vec{F} sei der Gesamtspin des Atoms

$$\vec{F} = \vec{j} + \vec{I} \quad (16)$$

Dann gilt, ähnlich wie bei der Feinstrukturaufspaltung

$$\Delta E_{HFS} \sim \vec{j} \cdot \vec{I} = \text{const} \cdot (F(F+1) - j(j+1) - I(I+1)) \quad (17)$$

Im Wasserstoffgrundzustand ($l = 0$) ist die Aufspaltung eine Folge der Wechselwirkung von Elektronspin und Kernspin, siehe Abbildung. Der Übergang zwischen $F = 0$ und $F = 1$ entspricht einer



Wellenlänge von 21 cm bzw. einer Frequenz von 1.4 GHz. Die zugehörige Energiedifferenz beträgt $6 \cdot 10^{-6}$ eV. Eine thermische Anregung ist also leicht möglich. Der spontane Übergang von $F = 1$ in den 'Grundzustand' mit $F = 0$ ist selten (erfordert Spinumklapp!), die Lebensdauer ist $\sim 10^7$ Jahre!

Seit der Entdeckung der 21 cm-Linie im Kosmos im Jahre 1951 hat diese eine große Bedeutung in der Astrophysik erlangt, weil man so Wasserstoffvorkommen lokalisieren kann.

Es gibt auch weitere Effekte, die zur Hyperfeinstrukturaufspaltung beitragen, z.B. aufgrund eines elektrischen Quadrupolmoments des Kerns.

FRAGE: In einem Mikrowellenherd arbeitet man mit $\lambda = 12.2$ cm. Hat das was mit der HF-Struktur zu tun ?

11.4. Spektroskopische Methoden

Moderne spektroskopische Methoden sind entscheidend für eine genaue Untersuchung der Atome.

Hier werden kurz zwei ‘Tricks’ vorgestellt und dann zur Messung der Lamb-Shift ‘eingesetzt’.

A) Zwei-Photon-Methode

Wenn man in sehr kurzem zeitlichen Abstand zwei Photonen auf ein Atom schießt, so dass die Summe der Photonenergien $E_1 + E_2$ einem erlaubten Energieniveau ΔE entspricht, so kann man das Atom anregen. Der Zeitabstand muss so klein sein, dass sich das Atom die fehlende Energie borgen kann (Unschärferelation):

$$\Delta t \cdot (\Delta E - E_1) \sim \hbar \quad (18)$$

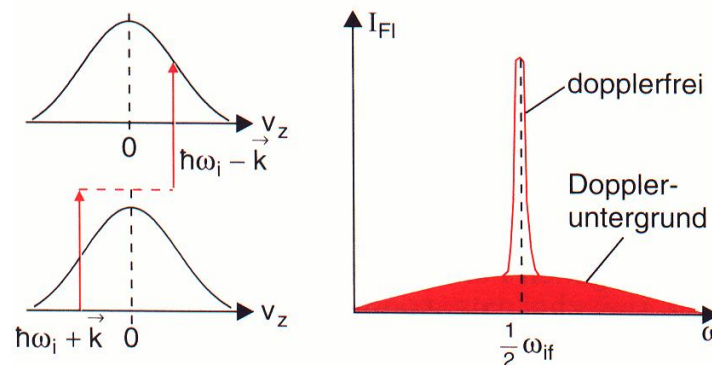
Die 2-Photon-Anregung ist aber sehr selten und entsprechende Experimente sind daher auf Laser (hohe Intensität) angewiesen.

Vorteile:

- Man kann Übergänge mit $\Delta l = 0$ oder $= 2$ anregen
- wenn man die beiden Photonen bei gleicher Frequenz von entgegengesetzten Richtungen aus auf das Atom schickt, so eliminiert man den Dopplereffekt, siehe Skizze. Dabei nutzt man aus, dass für nichtrelativistische Teilchen die Doppler-Energieverschiebung des eintreffenden Photons linear von der Geschwindigkeit abhängt:

$$\Delta E \sim \Delta \nu \sim v \quad (19)$$

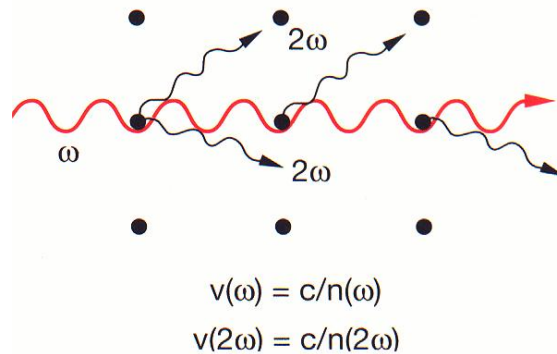
Man kann dies einfach realisieren, indem man das Atom vor einen Spiegel setzt: Einfallendes La-



serlicht und reflektiertes Licht zusammen erfüllen genau obige Bedingungen. Durch Ausschalten des Dopplereffektes kann man die spektroskopische Auflösung (Wellenlänge bzw. Frequenz bzw. Energie) deutlich erhöhen - bis zur intrinsischen Linienbreite $\Gamma \approx \hbar/\tau$, wobei τ die Lebensdauer des angeregten Zustandes ist.

B) Optische Frequenzverdopplung

Bei sehr hohen ‘angelegten’ Feldstärken ist die Reaktion eines Mediums (schwingende und strahlende Dipole) nicht mehr linear. Außer reinen harmonischen Schwingungen treten Oberwellen u.a. mit der doppelten Frequenz auf: Deren Intensität ist schwach; allerdings können sie sich verstärken, wenn



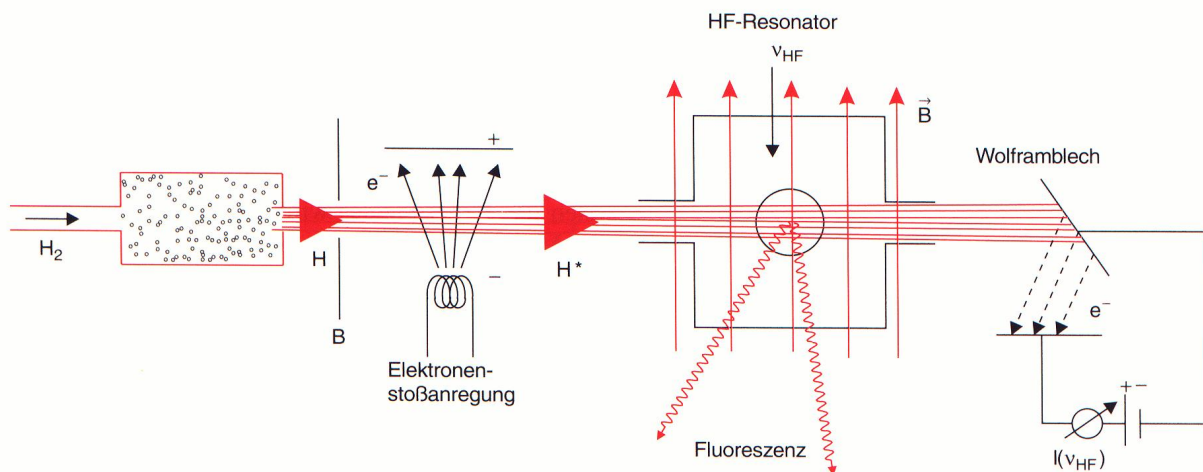
die Phasengeschwindigkeiten bei der Grundfrequenz und bei der verdoppelten Frequenz gleich sind, denn dann werden die Atome bei Anregung mit einer durchlaufenden Welle (Laserpuls) in Phase zu Schwingungen mit 2ω angeregt, und die Amplituden (nicht Intensitäten) der emittierten Strahlung addieren sich. Normalerweise verhindert die Dispersion die Gleichheit $v(2\omega) = v(\omega)$, siehe Skizze. In doppeltbrechenden Kristallen kann man aber bei einem bestimmten Winkel der Ausbreitungsrichtung zur optischen Achse erreichen, dass die Bedingung für den außerordentlichen Strahlanteil erfüllt wird: $n_a(2\omega) = n_o(\omega)$. Nach Durchquerung des Materials enthält der Lichtstrahl dann beide Frequenzanteile. Beispiel: siehe unten.

Beachte: Frequenzverdopplung bedeutet Energieverdopplung! Der Strahl besteht also jetzt u.a. aus Photonen der doppelten Energie!

Man wendet diese Methode z.B. dann an, wenn man einen Laserstrahl im optischen Frequenzbereich hat, dessen Energie aber um etwa einen Faktor 2 zu klein ist.

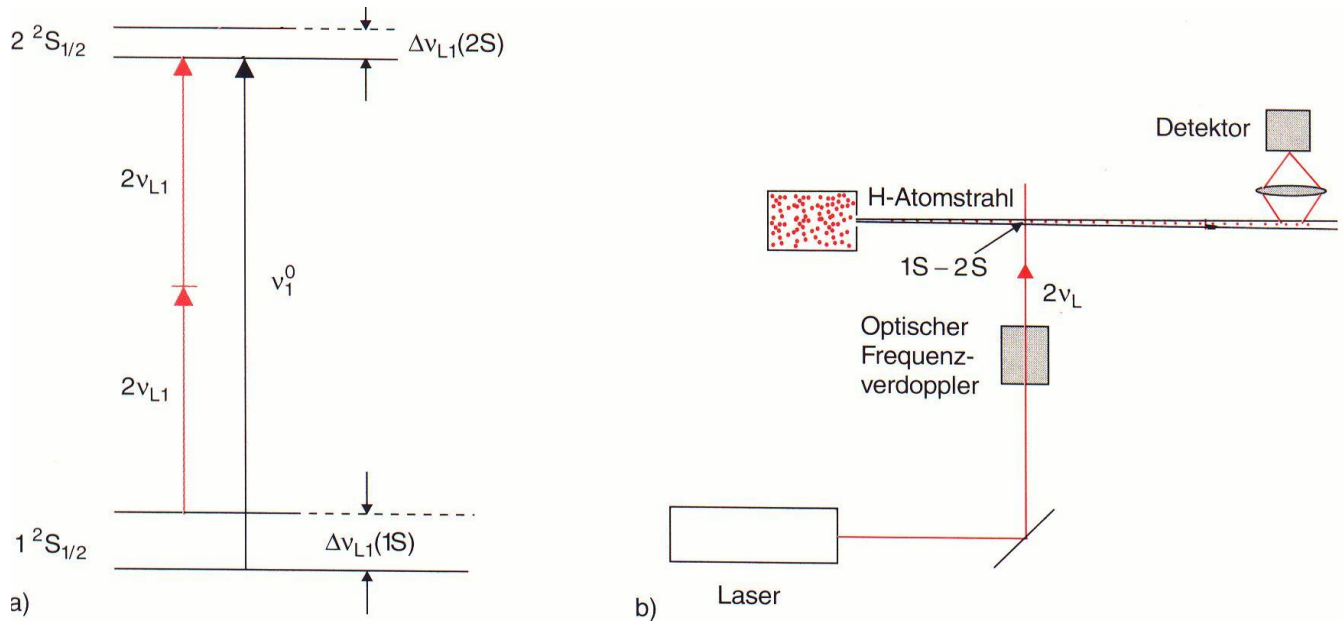
11.4.1. Messung der Lamb-Shift

a) Jetzt wollen wir etwas genauer die Messungen zur Lamb-Shift ansehen, zuerst die von Lamb und Retherford angewandte: H_2 wird in einem Ofen bei hoher Temperatur in H-Atome aufgespalten



(und auch beschleunigt). Die Wasserstoffatome werden durch Stöße (u.a.) in den *angeregten Zustand* $2S_{1/2}$ versetzt und durch einen Resonator auf ein Wolframblech gelenkt, wo ihre Intensität über den dort fließenden Strom nachgewiesen werden kann. Letzterer tritt auf, weil bei Abgabe der An-

regungsenergie von etwa 10 eV aus dem Metall Elektronen ausgelöst werden können. H-Atome im Grundzustand tragen nicht zum Strom bei.



Die $2S$ -Zustände sind mit $\tau \sim 1$ s recht langlebig, da ein direkter Übergang in den Grundzustand durch die Auswahlregeln verhindert wird. Strahlt man aber in den HF-Resonator eine Frequenz ein, die der Energiedifferenz der Terme $2S_{1/2}$ und $2P_{1/2}$ entspricht, induziert man entsprechende Übergänge. Da die P -Zustände dann mit einer für erlaubte Atomübergänge typischen Lebensdauer von $\sim 10^{-8}$ s in den Grundzustand zerfallen, tragen sie nicht zum Strom bei. Durch Messung des Stromes als Funktion der Hochfrequenz kann man also die Linienaufspaltung messen. Das Magnetfeld ist eigentlich nicht erforderlich; mehr dazu in der Literatur (z.B. Demtröder). Messergebnis (1.05 GHz) und Rechnung stimmen gut überein.

b) Um die Lambshift im *Grundzustand* zu messen, wo sie mit 8.17 GHz am größten ist, wendet man die 2-Photon-Methode an. Vereinfachte Darstellung: Man regt den $1S \rightarrow 2S$ -Übergang an ($\Delta l = 0!$), mit 2 Photonen. Dazu benötigt man $13.6 \text{ eV} \cdot (1 - 1/4) \sim 10.2 \text{ eV}$. Da die 'Abregung' sehr langlebig ist (2 Photonen!), ist die natürliche Linienbreite sehr klein. (s. folgende Vorlesungen). Man benutzt einen kalten Atomstrahl und schießt die Photonen von beiden Seiten ein, um den Dopplereffekt weitgehend zu eliminieren. Der Farbstofflaser ist in der Wellenlänge in bestimmten Grenzen um 486 nm (entspricht 2.05 eV) herum variabel. Mit Hilfe des Frequenzverdopplers wird die erforderliche Photonenergie erreicht: $10.3 \text{ eV} = 4 \cdot 2.05 \text{ eV}$. Durch Stöße können die $2S$ -Zustände in $2P$ -Atome umgewandelt werden, die dann im Detektor durch Lichtaussendung nachgewiesen werden. Man variiert die Laser-Frequenz bis maximale Anregung beobachtet wird. Da man die $2S$ -Lamb-Shift schon kennt (s.oben), kann man aus der gemessenen Anregungsfrequenz die $1S$ -Lamb-Verschiebung bestimmen.

Man erreicht Genauigkeiten von $< 1 \text{ kHz}$ (besser als 10^{-12} relativ) und findet exzellente Übereinstimmung mit den Rechnungen im Rahmen der Quantenelektrodynamik.

11.5. Zusammenfassung

