

Inhaltsverzeichnis

1	Wiederholungen aus der Physik III	3
1.1	Lichtquanten und die Planck-Einstein-Relationen	3
1.2	Materiewellen	4
1.3	Aufbau der Atome	4
1.4	Limitierungen des Rutherford'schen Atommodells	5
1.5	Das Spektrum des Wasserstoffatoms	5
1.6	Bohr'sches Atommodell des H-Atoms	7
1.7	Limitierungen des Bohr'schen Atommodells	9
2	Quantenmechanische Beschreibung des Wasserstoffatoms	10
2.1	Schrödinger-Gleichung für Ein-Elektron-Atome	10
2.2	Lösung in sphärischen Koordinaten	11
2.2.1	Bedeutung von l und m_l	12
2.3	Energieeigenwerte	12
2.4	Der Radialteil der Wellenfunktion	14
2.5	Einige Eigenschaften der gebundenen Wellenfunktion	16
2.5.1	Wahrscheinlichkeitsdichte und Parität	16
2.5.2	Erwartungswerte	18
3	Feinstruktur des H-Atoms	20
3.1	Hinweise auf Elektronenspin	20
3.2	Relativistische Korrekturterme	22
3.2.1	Spin-Operator und Pauli-Wellenfunktion	23
3.2.2	Energieverschiebungen	24
4	Hyperfeinstruktur und Isotopieverschiebung	28
4.1	Hyperfeinstruktur	28
4.1.1	Hyperfein-Wechselwirkung	29
4.2	Isotopieverschiebung	31
4.2.1	Masseneffekt	31
4.2.2	Volumeneffekt	32

5	Strahlungsübergänge	34
5.1	Einsteins A- und B-Koeffizienten	34
5.2	Übergangsraten	35
5.3	Die elektrische Dipolnäherung	38
5.4	Auswahlregeln für l und m_l	40
6	Zwei-Elektronen-Atome	44
6.1	Schrödingergleichung für Zwei-Elektron-Atom	44
6.2	Störungstheoretische Behandlung	45
6.3	Grundzustand des He-Atoms	47
6.4	Die angeregten Zustände des He-Atoms	48
6.4.1	Termbezeichnungen im He-Atom	50
6.5	Spinfunktionen der Elektronen und Pauli-Prinzip	51
7	Mehrelektronen Atome	54
7.1	Die Zentralfeld-Näherung	54
7.2	Spinfunktionen und Pauli-Prinzip	55
7.3	Elektronenzustände in Zentralfeld-Konfiguration und Schalen	56
7.4	Selbstkonsistente Berechnung des Zentralfeldes	57
8	Grundlegende Konzepte der Kernphysik	59
8.1	Der Atomkern	59
8.1.1	Kernbausteine	59
8.2	Eigenschaften des Grundzustandes von Kernen	60
8.2.1	Ladungsverteilung von Atomkernen	61
8.2.2	Masse von Atomkernen	62
8.2.3	Semi-empirische Massenformel	66
8.3	Spin und Momente von Atomkernen im Grundzustand	68
8.3.1	Kernspin	68
8.3.2	Magnetisches Dipolmoment	68
8.3.3	Das elektrische Quadrupolmoment	69
9	Kernmodelle	73
9.1	Fermigasmodell	73
9.2	Schalenmodell	77

Kapitel 1

Wiederholungen aus der Physik III

1.1 Lichtquanten und die Planck-Einstein-Relationen

- 19. Jahrhundert: Interferenz, Beugung \rightarrow Licht ist eine Welle (Maxwell-Gleichungen)
- Planck (1900): Energie ist quantisiert; Die einzig möglichen Energien einer elektromagnetischen Welle der Frequenz ν sind ganzzahlige Vielfache des Quantums $h\nu$ (\rightarrow Spektrum Schwarzkörperstrahlung)
- Einstein (1905): Licht besteht aus „Lichtquanten“ (Photonen) der Energie $h\nu$ wobei h eine Naturkonstante ist mit dem Wert $h = 6.625 * 10^{-34} Js$ (Planck'sches Wirkungsquantum)
- Schlussfolgerung: Die Wechselwirkung einer elektromagnetischen Welle mit Materie erfolgt mittels elementarer, unmittelbarer Prozesse, bei denen die Strahlung aus Teilchen (den „Photonen“ (G.Lewis 1926)) zu bestehen scheint.
- Teilcheneigenschaften: Energie E und Impuls \vec{p}
- Welleneigenschaften: Frequenz ν und Wellenvektor $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ Eigenschaften sind verknüpft über die Planck-Einstein-Relationen $E = h\nu = \hbar\omega$ und $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ Daraus folgt

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (1.1)$$

- Licht verhält sich also gleichzeitig wie Welle und wie Teilchenfluss (Welle-Teilchen-Dualismus)

1.2 Materiewellen

- de-Broglie (1923): Welle-Teilchen-Dualismus ist auch auf Materiewellen anzuwenden!
- Wellenlänge der Materiewelle eines Teilchens:

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{p} \quad (1.2)$$

- Experimentelle Bestätigung unter anderem durch Davisson und Germer (1927). Interferenzmaximum bei Reflexionen langsamer Elektronen an Ni-Einkristallen.
- Was genau „schwingt“ bei einer Materiewelle? Quantenmechanik: Wellenfunktion $\psi(r) : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ (Wahrscheinlichkeitsamplitude)
- Was ist das? Rechenwerkzeug:

$$\rho(r) = \int_V |\psi(\vec{r})|^2 d^3 \vec{r} \quad (1.3)$$

- Woher kommen die Interferenzphänomene? Durch Betragsbildung in Verbindung mit Superpositionsprinzip: $\psi_C = \psi_A + \psi_B \rightarrow |\psi_C|^2 = |\psi_A|^2 + |\psi_B|^2 + \psi_A^* \psi_B + \psi_A \psi_B^* = |\psi_A|^2 + |\psi_B|^2 + 2\text{Re}(\psi_A^* \psi_B)$
- Was sind die erlaubten Wellenfunktionen eines Teilchens?

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t) \quad (1.4)$$

bzw.

$$\hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (1.5)$$

wobei \hat{H} der Hamiltonoperator ist.

- freies Teilchen:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} \quad (1.6)$$

Teilchen im äußeren Potential:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad (1.7)$$

1.3 Aufbau der Atome

- Ende des 19. Jahrhunderts: Experimente (z.B. Kanal- und Kathodenstrahlenröhren) \rightarrow Materie besteht aus geladenen Teilchen

- Ablenkung in elektrischen und/oder magnetischen Feldern:
Kanalstrahlen $\hat{=}$ positiv geladenen Teilchen
Kathodenstrahlen $\hat{=}$ negativ geladenen Teilchen
- $\frac{|q|}{m}$ ist bei Kathodenstrahlen (e^-) um etwa 10^4 größer als bei Kanalstrahlen (positive Ionen)
- Wie sind die positiven und negativen Ladungen räumlich im Atom verteilt?
→ Streuexperimente von Rutherford
→ Streuintensität von α - Teilchen an dünner Goldfolie lässt sich außer für sehr große Streuwinkel an einem Coulomb-Potential beschreiben (Rutherford'sche Streuformel)
- Deutung des Ergebnis: → Rutherford'sches Atommodell (1911)
 - Atomkern mit Radius $R \approx 10^{-14}m$ enthält praktisch gesamte Masse des Atoms. Die leichten Elektronen beeinflussen die Bahn der α -Teilchen nicht wirklich.
 - Kernladung: Ze mit der Ordnungszahl Z
 - Im Abstand $r > R$ vom Kern herrscht Coulomb-Feld

$$E(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{r^3} \hat{r} \quad (1.8)$$

1.4 Limitierungen des Rutherford'schen Atommodells

- Annahme: Elektronen kreisen auf „Planetenbahnen“ im Coulombfeld des Kerns.
- Problem: Beschleunigte Ladungen strahlen elektromagnetische Wellen ab und verlieren so Energie → Elektron würde nach 100ps in den Kern stürzen.
- Schlussfolgerung: Bewegungsgleichungen auf atomarer Skala müssen modifiziert werden.
- Problem 2: Rutherford's Atommodell erklärt nicht die Existenz atomarer Linienspektren.

1.5 Das Spektrum des Wasserstoffatoms

- Motivation 1: Innere Struktur der Atome \leftrightarrow Spektrum der emittierten/absorbierten Strahlung
→ Theorie muss Spektren erklären können bzw. kann sie anhand dieser überprüft werden.

- Motivation 2: Wasserstoff ($p + e^-$) ist leichtestes und einfachstes Atom \rightarrow hat fundamentale Rolle
- Kirchhoff (Mitte des 19. Jahrhunderts) mit Hilfe von Beugungsgittern. Jedes Element besitzt charakteristisches Linienspektrum; Emissions- und Absorptionsfrequenzen stimmen überein.
- Zunächst empirische Erkenntnis (Rydberg 1889):
Gesamtes H-Spektrum besteht aus mehreren Serien, die beschrieben werden durch

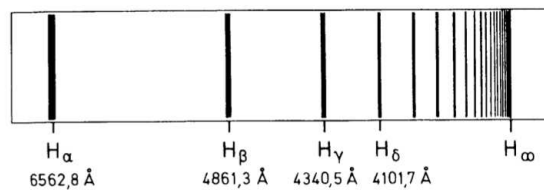
$$\bar{\nu} = R_H \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1.9)$$

wobei $R_H = 109677,5810 \text{ cm}^{-1}$ die Rydberkonstante und $n' < n$ mit $n', n \in (\mathbb{Z})$ (Hauptquantenzahlen) ist.

- Bezeichnungen der Spektralserien
 - $n'=1$: Lyman
 - $n'=2$: Balmer
 - $n'=3$: Paschen
 - $n'=4$: Brackett
 - $n'=5$: Pfund
- Bezeichnung der Linien: α, β, γ (Wellenlängen nehmen von links nach rechts ab)

Balmer Serie von Wasserstoff

Gemessen in Emission:

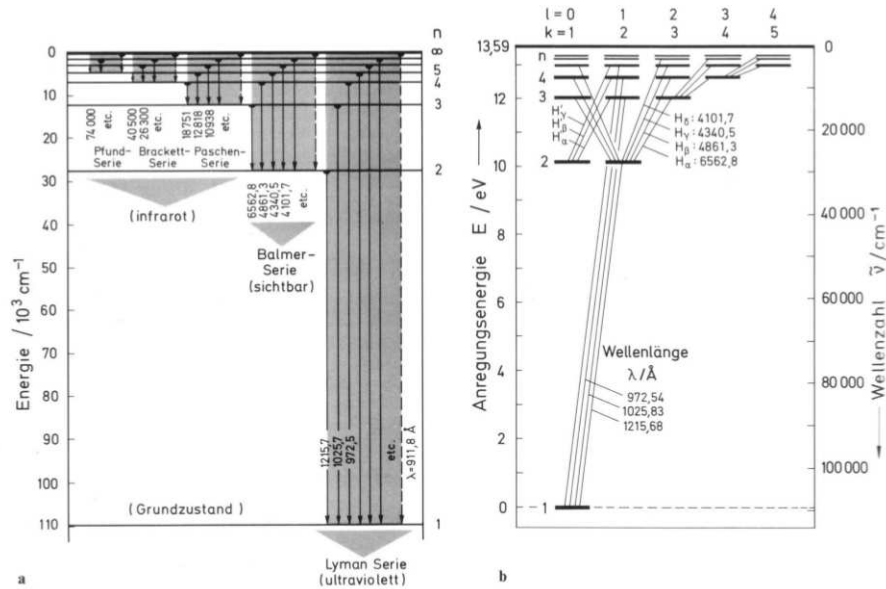


Haken Wolf, Atom- und Quantenphysik, Springer

- Wellenzahlen der Linien des H-Spektrums ist die Differenz von je zwei en der Form $\frac{R_H}{n^2}$

- $\frac{R_H}{n^2}$: Energieniveaus des Elektrons im H-Atom
- graphische Darstellung der Spektrallinien als Übergänge im Energieschema

Termschema für Wasserstoff



Haken Wolf, Atom- und Quantenphysik, Springer

1.6 Bohr'sches Atommodell des H-Atoms

- Bohr (1913): Postulat von Einschränkungen der erlaubten Planetenbahnen der Elektronen
 - Betrag von Bahndrehimpuls ist quantisiert (Vielfaches von \hbar)

$$p \cdot r = l\hbar, \quad l = 1, 2, 3, \dots \quad (1.10)$$

(Bohr betrachtete nur Kreisbahnen)

Weitere Postulate:

- Bewegung der Elektronen auf Bahnen erfolgt strahlungsfrei
- Strahlungsübergänge möglich zwischen Zuständen von Elektronen, deren Energien zwei solcher Bahnen entsprechen → Übergang zwischen Zuständen $E_b > E_a$ erfolgt unter Emission/Absorption von Photonen mit Energie

$$h\nu = E_b - E_a \quad (1.11)$$

- Bohr'sches Atommodell liefert sehr gute Übereinstimmung mit den Experimenten
- Klassischer Bahnradius für $n = 1, Z = 1$ von

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2m_0} = 5,291177 * 10^{-11}m \quad (1.12)$$

(Bohr'scher Bahnradius)

- Bindungsenergie des Grundzustandes ($n = 1, n' = \infty$)

$$E = -\frac{1}{2} \frac{m}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = 13,6 * Z^2 \text{ eV} \quad (1.13)$$

(Ionisierungsenergie)

- Energieterme:

$$E_n = (-13,6\text{eV}) \frac{Z^2}{n^2} \quad (1.14)$$

Wasserstoff ($Z = 1$)

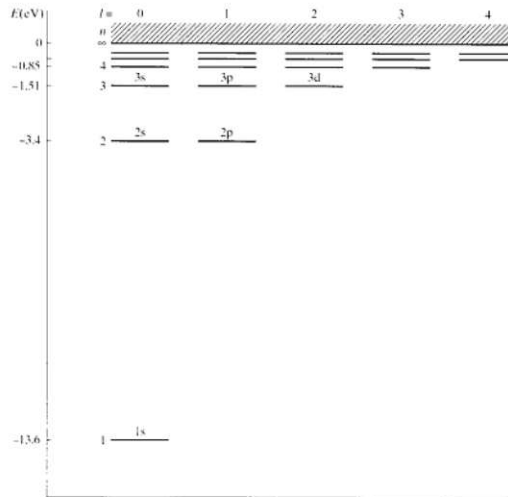
$$\rightarrow E_{ion} = 13,6\text{eV} (= 1\text{Rydberg}) \quad (1.15)$$

- Betrachte: Gute Übereinstimmung von Gleichung (1.15) mit Experiment bis $\approx Z = 20$; Grund: relativistische Effekte
Betrachte Bahngeschwindigkeit des Elektrons für den Grundzustand:

$$\frac{v}{c} = \frac{Z^2e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \alpha Z^2 \approx \frac{Z^2}{137} \quad (1.16)$$

mit $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}$. α nennt man Feinstrukturkonstante. (Für große Z muss die relativistische Massenzunahme berücksichtigt werden)

Energiespektrum des H-Atoms



Bransden & Joachain, Physics of Atoms and Molecules, Prentice Hall

1.7 Limitierungen des Bohr'schen Atommodells

- Die verwendeten Annahmen bleiben unerklärt und sind teilweise fragwürdig (nur kreisförmige Bahnen, ...)
- Modell kann nicht auf System $\geq 2e^-$ erweitert werden
- Die Übergangsraten bei Emission/Absorption von Strahlung können nicht berechnet werden.
- Sommerfeld hat das Bohr'sche Atommodell weiter verfeinert, schließlich wurde es aber abgelöst durch die Quantenmechanik.

Kapitel 2

Quantenmechanische Beschreibung des Wasserstoffatoms

H-Atom: Nichtrelativistisches Zwei-Teilchen-System mit Coulomb-Wechselwirkung.
Relativistische Effekte \rightarrow kleine Korrekturen \rightarrow wird später behandelt

2.1 Schrödinger-Gleichung für Ein-Elektron-Atome

H-ähnliches Atom mit Kernladung Ze und 1 Elektron.

Sei M_K die Kernmasse und m_0 die Elektronenmasse.

Führe Gesamtimpuls \vec{p} , Relativimpuls \vec{p}_{rel} und den Abstand von Kern-Elektron r ein:

$$\vec{p} = \vec{p}_K + \vec{p}_0 \quad (2.1)$$

$$\vec{p}_{rel} = \frac{M_K \vec{p}_0 - m_0 \vec{p}_K}{M_K + m_0} \quad (2.2)$$

$$r = |\vec{r}_k - \vec{r}_0| \quad (2.3)$$

Innere Energie E der Relativbewegung \rightarrow löse zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\hat{H}\psi = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}} \right] \psi = E\psi \quad (2.4)$$

mit der reduzierten Masse

$$m_r = \frac{m_0 M_K}{m_0 + M_K} \quad (2.5)$$

In Ortsdarstellung:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_r} \vec{\nabla}^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (2.6)$$

2.2 Lösung in sphärischen Koordinaten

$V(\vec{r}) = \text{Zentralpotential} \rightarrow \text{Separation bezüglich Radial- und Winkelanteile}$

Ansatz:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi) \quad (2.7)$$

wobei

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi) \quad (2.8)$$

Schreibt man $\vec{\nabla}^2$ in (2.6) in sphärischen Polarkoordinaten, so erhält man drei Differentialgleichungen (eine pro Koordinate):

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = -m_l^2 \Phi \quad (2.9)$$

$$-\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin(\theta) \frac{\partial \Theta}{\partial \theta}) + \frac{m_l^2}{\sin^2(\theta)} \Theta = l(l+1) \Theta \quad (2.10)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial R}{\partial r}) - \frac{l(l+1)}{r^2} R - \frac{2m_r}{\hbar^2} V(r)R + \frac{2m_r E}{\hbar^2} R = 0 \quad (2.11)$$

mit den Separationskonstanten m_l^2 und $l(l+1)$.

Mit mathematischen Methoden findet man Lösungen von (2.10) $P_l^{m_l}(\cos\theta)$ (assoziierte Legendre-Polynome vom Grad l mit $l = 0, 1, 2, \dots$) und $m_l \in \mathbb{Z}$ mit $|m_l| \leq l$

Lösung von (2.9):

$$\Phi = \exp(im_l \phi) \quad (2.12)$$

Somit folgt

$$Y(\theta, \phi) = Y_l^{m_l}(\theta, \phi) = N_l^{m_l} P_l^{m_l}(\cos\theta) \exp(im_l \phi) \quad (2.13)$$

wobei $Y_l^{m_l}$ die Kugelflächenfunktionen sind.

Normierung für $m_l \geq 0$ (für $m_l \leq 0$ gilt entsprechendes)

$$N_l^{m_l} = (-1)^{m_l} \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m_l)!}{(l+m_l)!} \right]^{1/2} \quad (2.14)$$

Es gilt

$$Y_l^{-m_l} = (-1)^{m_l} Y_l^{m_l*} \quad (2.15)$$

und

$$\int Y_l^{m_l} Y_l^{m_l*} d\Omega = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin(\theta) d\theta Y_l^{m_l*} Y_l^{m_l} = 1 \quad (2.16)$$

sowie die Orthogonalitätseigenschaft

$$\int Y_l^{\tilde{m}_l*} Y_l^{m_l} d\Omega = \delta_{m_l, \tilde{m}_l} \delta_{l, \tilde{l}} \quad (2.17)$$

2.2.1 Bedeutung von l und m_l

Bahndrehimpuls-Operator:

$$\hat{l} = \hat{r} \times \hat{p} \quad (2.18)$$

Erinnerung:

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar \hat{l}_z \quad (2.19)$$

aber

$$[\hat{l}_z, \hat{l}^2] = 0 \quad (2.20)$$

→ es existieren simultan Eigenfunktionen zu l_z und $l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2$
Explizite Form in Ortsdarstellung und Polarkoordinaten.

$$\hat{l}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (2.21)$$

$$l^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (2.22)$$

Verknüpfung von (2.9) und (2.10) liefert Eigenwertgleichung

$$\hat{l}^2 Y_l^{m_l} = l(l+1)\hbar^2 Y_l^{m_l}, l = 0, 1, 2, \dots \quad (2.23)$$

Außerdem gilt

$$\hat{l}_z Y_l^{m_l} = m_l \hbar Y_l^{m_l}, m_l = -l, -l+1, \dots, l \quad (2.24)$$

Schlussfolgerung:

- $m_l \hbar$: Erwartungswert von \hat{l}_z (z-Komponente des Bahndrehimpulses); man nennt m_l magnetische Quantenzahl
- $l \hbar$: maximaler Erwartungswert von \hat{l}_z , man nennt l Bahndrehimpulsquantenzahl

Beachte: \hat{l}_z und \hat{l}^2 wirken nicht auf $R(r) \rightarrow \psi(r, \theta, \phi)$ ist simultan Eigenfunktion von \hat{l}_z, \hat{l}^2 und \hat{H}

2.3 Energieeigenwerte

Bestimmung von $E \rightarrow$ löse (2.11)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_r} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] R_{E,l}(r) = ER_{E,l}(r) \quad (2.25)$$

Vereinfachung durch

$$U_{E,l}(r) = r R_{E,l}(r) \quad (2.26)$$

Daraus folgt

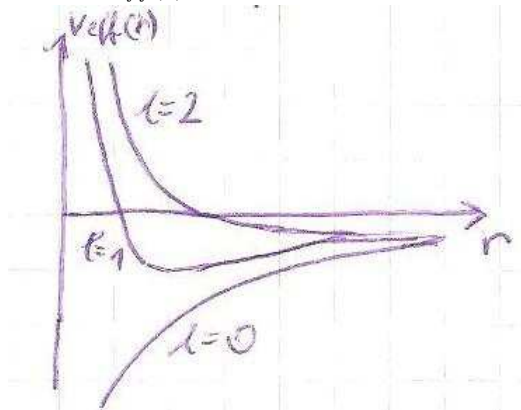
$$\frac{\partial^2 U_{E,l}}{\partial r^2} + \frac{2m_r}{\hbar^2} [E - V_{eff}(r)] U_{E,l} = 0 \quad (2.27)$$

Eindimensionale Radialgleichung mit dem effektiven Potential

$$V_{eff}(r) = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_r r^2} \quad (2.28)$$

Beachte:

- Gleichung (2.27) $\hat{=}$ eindimensionaler Schrödingergleichung für Teilchen mit Masse m_r , das sich unter dem Einfluss eines Coulomb-Potentials und einer Zentrifugalbarriere $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_r r^2}$ bewegt
- Verlauf $V_{eff}(r)$:



$V_{eff}(r) \rightarrow 0$ für $r \rightarrow \infty$ daraus folgt $E < 0$: gebundene Zustände, und $E > 0$: freie Zustände

Führe dimensionslose Größen ein:

$$\rho = \left(-\frac{8m_r E}{\hbar^2} \right)^{1/2} r \quad (2.29)$$

und

$$\lambda = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \left(-\frac{m_r}{2E} \right)^{1/2} = Z\alpha \left(-\frac{m_r c^2}{2E} \right)^{1/2} \quad (2.30)$$

was uns zu

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right] U_{E,l} = 0 \quad (2.31)$$

führt.

Physikalische Lösungen ($U_{E,l}(\rho)$ endlich für $r \rightarrow \infty$)
 \rightarrow Bedingung für

$$\lambda \rightarrow \lambda = n \quad (2.32)$$

mit $n \geq l+1 \in \mathbb{Z}$ wobei n als Hauptquantenzahl bezeichnet wird. Einsetzen in (2.30) liefert die Energieeigenwerte

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_r}{\hbar^2} \quad (2.33)$$

bzw.

$$E_n = -\frac{1}{2}m_r c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \quad (2.34)$$

Beachte:

- $n = 1, 2, 3, \dots \rightarrow \infty$ viele gebunden Zustände mit $E = -\frac{1}{2}m_r c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}$ bis $E = 0$
- E hängt von n ab und ist bezüglich l und m_l entartet.

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (2.35)$$

- Entartung bezüglich m_l folgt direkt aus Zentralpotential
- Entartung bezüglich l gilt nur für Coulomb-Potential
→ Abweichungen vom Coulomb-Potential → $E_{n,l}$
- Historische Bezeichnungen:
 - $l=0$: s(harp)-Zustand
 - $l=1$: p(rincipal)-Zustand
 - $l=2$: d(iffuse)-Zustand
 - $l=3$: f(undamental)-Zustand
 - $l=4$: g
 - $l=5$: h
 - usw.

2.4 Der Radialteil der Wellenfunktion

explizite Lösung von (2.33) liefert

$$R_{n,l}(r) = \frac{u_{n,l}(r)}{r} = N_{n,l} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \quad (2.36)$$

mit den assoziierten Laguerre-Polynomen $L_q^p(\rho)$ und

$$N_{n,l} = \left(-\frac{2Z}{na'}\right) \frac{(n-l-1)!}{2n [(n+1)!]^3} \quad (2.37)$$

mit

$$\rho = \frac{2Z}{na'} r \quad \text{und} \quad a' = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_r e^2} = a_0 \frac{m_0}{m_r} \quad (2.38)$$

Beachte:

- $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ ist ein Polynom der Ordnung $(n+l) - (2l+1) = n-l-1 =: n_r$.
Man nennt n_r auch radiale Quantenzahl.

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = \sum_{k=0}^{n-l-1} (-1)^k \frac{[(n+l)!]^2}{(n-l-1-k)!(2l+1+k)!} \frac{\rho^k}{k!} \quad (2.39)$$

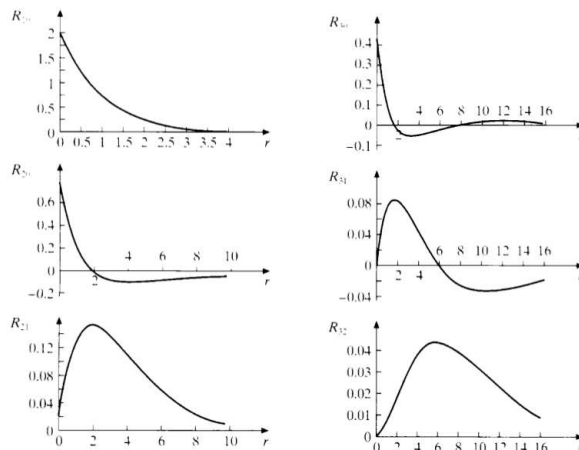
Beispiele:

$$\begin{aligned} R_{10} &= 2 \left(\frac{Z}{a'}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{Zr}{a'}\right) \\ R_{20} &= 2 \left(\frac{Z}{2a'}\right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{Zr}{2a'}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2a'}\right) \\ R_{21} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a'}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Z}{a'}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2a'}\right) \end{aligned} \quad (2.40)$$

Vollständige Wellenfunktion:

$$\psi_{n,l,m_l}(\vec{r}) = R_{n,l}(r) Y_l^{m_l}(\theta, \phi) \quad (2.41)$$

Radialteil der Wellenfunktionen



Bransden & Joachain, Physics of Atoms and Molecules, Prentice Hall

2.5 Einige Eigenschaften der gebundenen Wellenfunktion

2.5.1 Wahrscheinlichkeitsdichte und Parität

Die Wahrscheinlichkeit ein Elektron im Volumenelement $d\vec{r} = r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi$ zu finden beträgt:

$$|\psi_{n,l,m_l}|^2 d\vec{r} = \psi_{n,l,m_l}^* \psi_{n,l,m_l} r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi \quad (2.42)$$

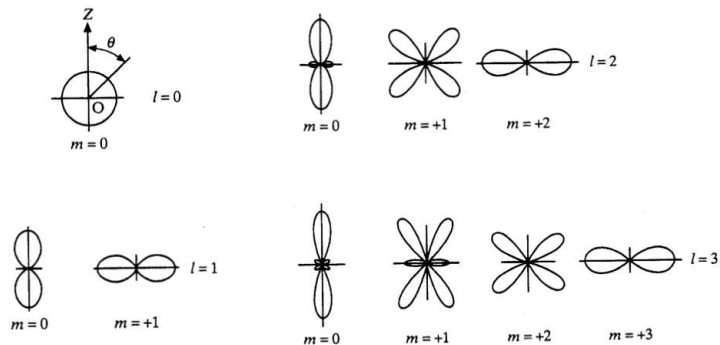
mit der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$|\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi)|^2 = |R_{n,l}(r)|^2 |Y_l^{m_l}(\theta, \phi)|^2 = |R_{n,l}(r)|^2 \left| \frac{1}{2\pi} \Theta_{l,m_l}(\theta) \right|^2 \quad (2.43)$$

Beachte:

- $|\psi_{n,l,m_l}|^2$ ist vollständig bestimmt durch das Produkt aus r -abhängigem Teil und polarer Verteilungsfunktion

Polare Verteilungsfunktionen

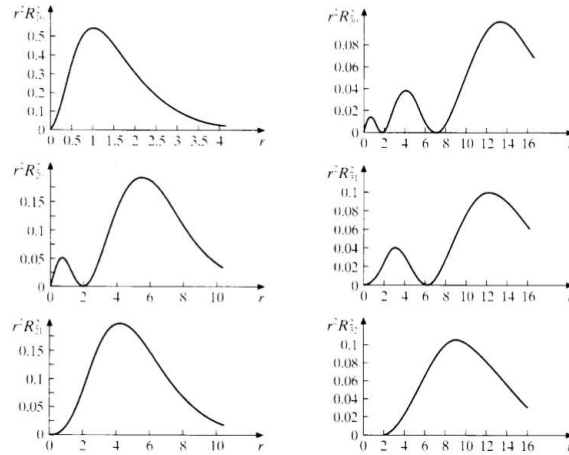


Bransden & Joachain, Physics of Atoms and Molecules, Prentice Hall

- Integration von (2.42) über θ und ϕ liefert die Wahrscheinlichkeitsdichte $D_{n,l}(r)$ (radiale Verteilungsfunktion), um das Elektron im Abstand r vom Kern zu finden.

$$D_{n,l}(r) = r^2 |R_{n,l}(r)|^2 dr \quad (2.44)$$

Radiale Verteilungsfunktionen



Bransden & Joachain, Physics of Atoms and Molecules, Prentice Hall

Allgemeine Eigenschaften von $R_{n,l}(r)$ und $D_{n,l}(r)$:

- $R_{n,l}(0) \neq 0$ nur für $l = 0$. Es gilt

$$|\psi_{n,0,0}(0)|^2 = \frac{1}{4\pi} |R_{n,0}(0)|^2 = \frac{Z^3}{\pi a'^3 n^3} \quad (2.45)$$

→ endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons am Kernort für $l = 0$ (wichtig für relative Korrekturen und Hyperfeinwechselwirkung)

-

$$l \neq 0 \rightarrow R_{n,l}(r) \sim r^l \text{ für } r \ll \frac{a'}{Z} \quad (2.46)$$

→ Zentrifugalbarriere hindert Elektron daran dem Kern zu nahe zu kommen.

- $L_{n,l}^{2l+1}(\rho)$ Polynom vom Grad $n_r = n - l - 1$

$$\rightarrow n_r \text{ radiale Knoten von } R_{n,l}(r) \quad (2.47)$$

$$\rightarrow D_{n,l}(r) \text{ hat } n - l \text{ radiale Maxima} \quad (2.48)$$

- Für $l = n - 1$ hat $D_{n,l}(r)$ genau ein Maximum bei

$$r_{max} = \frac{n^2 a'}{Z} \quad (2.49)$$

Beachte:

- r_{max} stimmt mit Bohr-Radius überein

- Quantenmechanik liefert präziseren Radius des Atoms: r_{max} ist wahrscheinlichste Entfernung

Betrachte das Verhalten der Wellenfunktion unter Anwendung des Paritätsoperators P

$$\begin{aligned} \vec{r} &\rightarrow -\vec{r} \\ (r, \theta, \phi) &\rightarrow (r, \pi - \theta, \phi + \pi) \end{aligned} \quad (2.50)$$

Man kann folgendes zeigen:

$$Y_l^{m_l}(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_l^{m_l}(\theta, \phi) \quad (2.51)$$

Also gilt

$$P\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = (-1)^l \psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) \quad (2.52)$$

$$\rightarrow \text{für } l \text{ gerade: } \psi_{n,l,m_l} \text{ gerade Parität} \quad (2.53)$$

$$\text{ungerade: } \psi_{n,l,m_l} \text{ ungerade Parität} \quad (2.54)$$

2.5.2 Erwartungswerte

- Erwartungswerte von r im Grundzustand

$$\begin{aligned} \langle \hat{r} \rangle_{100} &= \langle \psi_{100} | \hat{r} | \psi_{100} \rangle \\ &= \int \psi_{100}^*(\vec{r}) r \psi_{100}(\vec{r}) d\vec{r} \\ &= \frac{3}{2} \frac{a'}{Z} \end{aligned} \quad (2.55)$$

\rightarrow 1,5 mal größer als Bohr-Radius

- Kreisbahnen $\rightarrow l = n - 1$ maximal

$$\langle \hat{r} \rangle_{n,l=n-1} = n^2 \left(1 + \frac{1}{2n} \right) \frac{a'}{Z} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{n^2 a'}{Z} \quad (2.56)$$

\rightarrow Bohr'sche Vorhersage als Grenzwert $n \rightarrow \infty$

(Beispiel für Korrespondenzprinzip)

- Erwartungswert der potentiellen Energie

$$\begin{aligned} \langle \hat{V} \rangle_{n,l,m_l} &= -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{\hat{r}} \right\rangle \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a'} \frac{Z^2}{n^2} \\ &= 2E_n \end{aligned} \quad (2.57)$$

- Kinetische Energie

$$\langle \hat{T} \rangle_{n,l,m_l} = E_n - \langle \hat{V} \rangle_{n,l,m_l} = -E_n \quad (2.58)$$

also

$$2\langle \hat{T} \rangle = -\langle \hat{V} \rangle \quad (2.59)$$

(Spezialfall des Virialtheorems: $2\langle T \rangle = -\langle \vec{r} \vec{\nabla} V \rangle$
für $V(r) \sim r^S = \langle \vec{r} \frac{\partial V}{\partial r} \rangle = S\langle V \rangle$)

Kapitel 3

Feinstruktur des H-Atoms

Bis jetzt: E_n und ψ_{n,l,m_l} auf Grund von einfachem, nicht-relativistischem Hamiltonoperator (E_{kin} ist nicht-relativistisch)

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}} \quad (3.1)$$

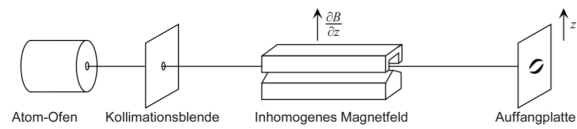
→ gute Übereinstimmung zwischen Vorhersagen und Experiment.

Aber: bei genauen Messungen → Abweichungen, die nicht mit \hat{H}_0 erklärt werden können. Das Problem konnte durch Einführung des Elektronenspins gelöst werden. (folgt aus der relativistischen Beschreibung) → Ergänzung von \hat{H}_0 durch relativistische Korrekturterme notwendig

3.1 Hinweise auf Elektronenspin

- Stern-Gerlach-Experiment (vgl. QM I)
 - klassisch erwartet: kontinuierliche Verteilung der transversalen Ablenkung
 - basierende auf nicht relativistischen quantenmechanischer Betrachtung erwartet: $2l + 1$ (ungerade, da l ganzzahlig) diskrete Werte für Ablenkung
 - Beobachtung von Stern-Gerlach: quantisierte Ablenkung Aber: für Ag-Atome zwei symmetrisch abgelenkte Spuren

Stern-Gerlach-Experiment

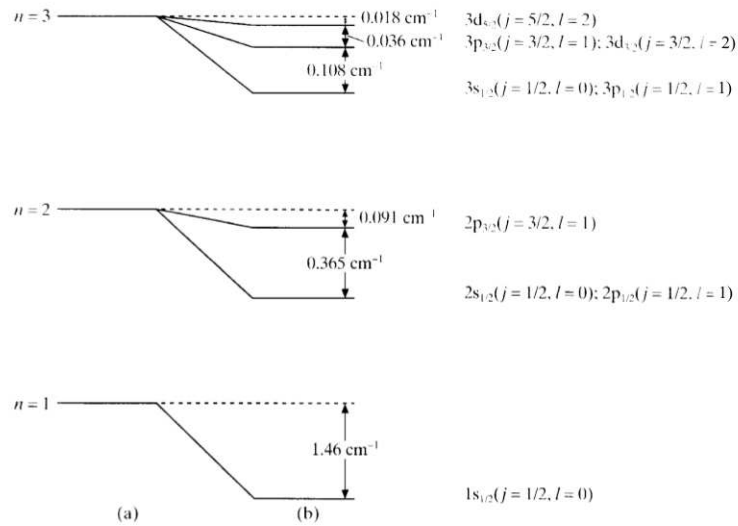


- Feinstruktur in optischen Spektren der Atome
Energieterm $E_{n,l}$ von Atomen mit nur einem Valenzelektron (insbesondere Alkalimetalle) spalten für $l \neq 0$ in zwei Terme auf \rightarrow spektrale Doppel-Linien (sog. Dubletts)
- Anomaler Zeeman-Effekt
Aufhebung der m-Entartung mittels externem B-Feld \rightarrow meistens gerade Anzahl von Energietermen (Erwartung für reinen Bahnmagnetismus: ungerade Anzahl, normaler Zeeman-Effekt)

Schlussfolgerung: Wir benötigen neue Quantenzahlen mit gerader Zahl von möglichen Projektionen bezüglich der Raumquantelung.

Uhlenbeck und Goudsmith (1925): Empirisches Postulat des Elektronenspins (Eigendrehimpuls) und ein damit verbundenes magnetisches Moment

Feinstruktur des H-Atoms



Bransden & Joachain, Physics of Atoms and Molecules, Prentice Hall

3.2 Relativistische Korrekturterme

Beachte:

- exakte Beschreibung der relativistischen Effekte im H-Atom \rightarrow Dirac-Gleichung
- Relativistische Korrekturterme sind klein \rightarrow verwende Schrödinger-Wellenfunktion für Störungsrechnung erster Ordnung unter Berücksichtigung von Korrekturtermen bis $\Theta(\frac{v^2}{c^2})$ im Dirac-Hamiltonoperator.

Man findet

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \quad (3.2)$$

mit

$$\hat{H}' = \hat{H}'_1 + \hat{H}'_2 + \hat{H}'_3 \quad (3.3)$$

wobei man

$$\hat{H}'_1 = -\frac{\hat{p}^4}{8m_0^3c^2} \quad (3.4)$$

den relativistischen Korrekturterm der kinetischen Energie,

$$\hat{H}'_2 = \frac{1}{2m_0^2c^2} \frac{1}{\hat{r}} \frac{\partial \hat{V}}{\partial \hat{r}} \hat{l} \hat{s} \quad (3.5)$$

den Spin-Orbit-Term und

$$\hat{H}'_3 = \frac{\pi\hbar^2}{2m_0^2c^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \delta(\vec{r}) \quad (3.6)$$

den Darwin-Term nennt.

3.2.1 Spin-Operator und Pauli-Wellenfunktion

Spin-Operator: \hat{s} wirkt auf Spin-Eigenfunktion $\chi_{\frac{1}{2},m_s}$ (wirkt im Raum der Spin-Variablen)

- Es gilt:

$$\hat{s}^2 \chi_{\frac{1}{2},m_s} = s(s+1)\hbar^2 \chi_{\frac{1}{2},m_s} = \frac{3}{4}\hbar^2 \chi_{\frac{1}{2},m_s} \quad (3.7)$$

mit $s = \frac{1}{2}$.

$$\hat{s}_z \chi_{\frac{1}{2},m_s} = m_s \hbar \chi_{\frac{1}{2},m_s} \quad (3.8)$$

mit $m_s = \pm \frac{1}{2}$.

- $\chi_{\frac{1}{2},m_s}$ sind orthonormal, d.h.

$$\chi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}^* \chi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = \chi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}^* \chi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = 1 \quad (3.9)$$

$$\chi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}^* \chi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = \chi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}^* \chi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = 0 \quad (3.10)$$

- Komponenten von \hat{s} gehorchen den Drehimpuls-Kommutatorregeln:

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hbar \hat{s}_z \quad (\text{und zykl. Permutationen}) \quad (3.11)$$

- Matrix-Darstellung

$$\hat{s} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad \text{mit} \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

also

$$\hat{s}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

In dieser Darstellung gilt:

$$\chi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} =: \alpha, \quad \chi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} =: \beta \quad (3.14)$$

→ allgemeine Spin-Wellenfunktion:

$$\chi = \chi_+ \alpha + \chi_- \beta = \begin{pmatrix} \chi_+ \\ \chi_- \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

- Für magnetisches Moment des Elektronenspins folgt aus der Dirac-Theorie:

$$\hat{\mu}_s = -g_s \mu_B \frac{\hat{s}}{\hbar} \quad (3.16)$$

mit $g_s = 2$ (Unterschied zum Bahnmagnetismus!!!)

Beachte:

- \hat{H}_0 wirkt nicht auf die Spin-Variablen \rightarrow ohne Spin-Orbit-Kopplung separiert die Elektronenwellenfunktion in Orts- und Spin-Variablen:

$$\psi_{n,l,m_l,m_s} = \psi_{n,l,m_l}(\vec{r}) \chi_{\frac{1}{2},m_s} \quad (3.17)$$

Das ist die Pauli-Wellenfunktion, auch Produktbasis genannt, wobei

$$\hat{H}_0 \psi_{n,l,m_l}(\vec{r}) = E_n \psi_{n,l,m_l}(\vec{r}) \quad (3.18)$$

3.2.2 Energieverschiebungen

$$\begin{aligned} \hat{H}'_1 &= -\frac{\hat{p}^4}{8m_0^3c^2} = -\frac{1}{2m_0c^2} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m_0} \right)^2 = -\frac{1}{2m_0c^2} \hat{T}_0^2 \\ &= -\frac{1}{2m_0c^2} (\hat{H}_0 - \hat{V}(\vec{r}))^2 \end{aligned} \quad (3.19)$$

\rightarrow Energieverschiebung 1. Ordnung

$$\begin{aligned} \Delta E_1 &= \langle \psi_{n,l,m_l} | \hat{H}'_1 | \psi_{n,l,m_l} \rangle \\ &= -\frac{1}{2m_0c^2} \langle \psi_{n,l,m_l} | (\hat{H}_0 - \hat{V}(\vec{r}))^2 | \psi_{n,l,m_l} \rangle \\ &= -\frac{1}{2m_0c^2} \left[E_n^2 - 2E_n \left\langle -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}} \right\rangle + \left\langle \frac{Z^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2\hat{r}^2} \right\rangle \right] \\ &= -\frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} E_n \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{l + \frac{1}{2}} \right) \end{aligned} \quad (3.20)$$

Beachte: ΔE_1 hängt von n und l ab und ist um den Faktor $\alpha^2 Z^2 \approx \frac{v^2}{c^2}$ kleiner als E_n .

$$\hat{H}'_2 = \frac{1}{2m_0^2c^2} \frac{1}{\hat{r}} \frac{\partial \hat{V}}{\partial \hat{r}} \hat{l} \hat{s}$$

Beachte: H'_2 folgt aus der relativen Bahnbewegung des Elektronenspins im elektrischen Feld des Kerns.

Schreibe $\hat{H}'_2 = \xi(r) \hat{l} \hat{s}$ mit

$$\xi(r) = \frac{1}{2m_0^2c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} = \frac{1}{2m_0^2c^2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \quad (3.21)$$

Berechnung der Energieverschiebung durch $\xi(r)\hat{l}\hat{s}$ mittels entarteter Störungsrechnung:

\hat{H}'_2 kommutiert mit \hat{l}^2 und \hat{s}^2 , aber nicht mit \hat{l}_z und \hat{s}_z

→ Diagonalisiere \hat{H}'_2 im Raum der $2(2l+1)$ Eigenfunktionen zu gegebenem $n, l, s = \frac{1}{2}$

→ Führe ein: Gesamtdrehimpulsoperator

$$\hat{j} = \hat{l} + \hat{s} \quad (3.22)$$

Es gilt:

$$\hat{j}^2 = \hat{l}^2 + 2\hat{l} \cdot \hat{s} + \hat{s}^2 \quad (3.23)$$

also

$$\hat{l} \cdot \hat{s} = \frac{1}{2}(\hat{j}^2 - \hat{l}^2 - \hat{s}^2)$$

Betrachte Wellenfunktion $\psi_{n,l,m_j}(\vec{r})$, die simultan Eigenzustände der Operatoren $\hat{H}_0, \hat{l}^2, \hat{s}^2, \hat{j}^2, \hat{j}_z$ mit Eigenwerten $E_n, l(l+1)\hbar^2, s(s+1)\hbar^2, j(j+1)\hbar^2, m_j\hbar$ sind (können aus Linearkombinationen der ψ_{n,l,m_l,m_s} gebildet werden (vgl. QM I, Kap. 5.5)).

Es gilt

$$j_{min} = |l - \frac{1}{2}| \quad j_{max} = l + \frac{1}{2} \quad (3.24)$$

und

$$m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j \quad (3.25)$$

Man kann leicht zeigen: $\hat{l} \cdot \hat{s}$ kommutiert mit $\hat{l}^2, \hat{s}^2, \hat{j}^2, \hat{j}_z$.
Es folgt: \hat{H}'_2 ist in der Basis ψ_{n,l,j,m_j} diagonal.

→ Energieverschiebung für $l \neq 0$

$$\begin{aligned} \Delta E_2 &= \langle \psi_{n,l,j,m_j} | \xi(r) \cdot \hat{l} \cdot \hat{s} | \psi_{n,l,j,m_j} \rangle \\ &= \left\langle \frac{\xi(r)}{2} (\hat{j}^2 - \hat{l}^2 - \hat{s}^2) \right\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \langle \xi(r) \rangle [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \\ &= \frac{m_0 c^2 (Z\alpha)^4}{4n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \cdot \begin{cases} l & \text{für } j = l + \frac{1}{2} \\ -(l+1) & \text{für } j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \end{aligned} \quad (3.26)$$

Beachte: für $l = 0$ verschwindet $\hat{H}'_2 \rightarrow \Delta E_2 = 0$ für $l = 0$

$$\hat{H}'_3 = \frac{\pi \hbar^2}{2m_0^2 c^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \delta(\vec{r})$$

Beachte: Dieser Term wirkt nicht auf Spinvariable, vertauscht mit \hat{l}^2 und \hat{l}_z und spielt nur für $l = 0$ eine Rolle.

→ Energieverschiebung:

$$\begin{aligned}
 \Delta E_3 &= \frac{\pi \hbar^2}{2m_0^2 c^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \langle \psi_{n00} | \delta(\vec{r}) | \psi_{n00} \rangle \\
 &= \frac{\pi \hbar^2}{2m_0^2 c^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) |\psi_{n00}(0)|^2 \\
 &= \frac{1}{2} m_0 c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \frac{(Z\alpha)^2}{n} \\
 &= -E_n \frac{(Z\alpha)^2}{n}
 \end{aligned} \tag{3.27}$$

für $l = 0$.

Insgesamt ergibt sich:

$$\Delta E_{nj} = \Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3 = E_n \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \tag{3.28}$$

Die relative Korrektur E_{nj} hängt nur von n und j ab.

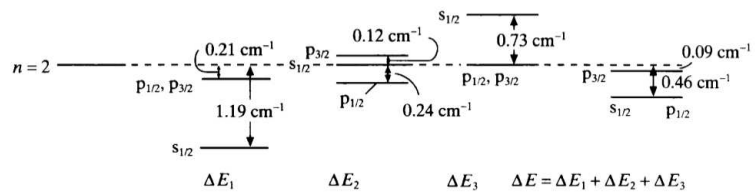
Für die Energieniveaus des H-Atoms findet man

$$E_{nj} = E_n \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right] \tag{3.29}$$

Beachte:

- Gesamtbindungsenergie wird durch relative Korrektur leicht erhöht
- $n \uparrow \rightarrow \Delta E_{nj} \downarrow$ $j \uparrow \rightarrow \Delta E_{nj} \downarrow$ $Z \uparrow \rightarrow \Delta E_{nj} \uparrow$

Verschiedene Beiträge zur Feinstruktur



Bransden & Joachain, Physics of Atoms and Molecules, Prentice Hall

Kapitel 4

Hyperfeinstruktur und Isotopieverschiebung

Bisher: Atomkern \rightarrow schwere Punktladung (Kernradius $\approx 10^{-4}\text{\AA} \ll$ Atomradius 1\AA)

Aber: Messungen mit sehr hoher spektraler Auflösung am H-Atom \rightarrow jede der Feinstrukturkomponente ist ihrerseits in zwei Komponenten aufgespalten: Energieverschiebung kleiner als Feinstruktur
 \rightarrow Hyperfein-Effekte

- {-} Aufspaltung von Niveaus („Hyperfeinstruktur“)
- {-} leichte Niveaueverschiebung zwischen Isotopen („Isotopieverschiebung“)

4.1 Hyperfeinstruktur

Berücksichtige weitere Eigenschaften der Atomkerne

Pauli 1924: Atomkerne haben Gesamtdrehimpuls, der durch die Quantenzahl I gegeben ist.

Kerne bestehen aus Protonen und Neutronen.

\rightarrow haben jeweils Spin $\frac{1}{2}$ und Bahndrehimpuls innerhalb des Kerns.

$\rightarrow I$ kann ganz- oder halbzahlig sein.

Es gilt:

$$\hat{I}^2|I, m_I\rangle = I(I+1)\hbar^2|I, m_I\rangle \quad (4.1)$$

und

$$\hat{I}_z|I, m_I\rangle = m_I\hbar|I, m_I\rangle, \quad \text{mit } m_I = -I, -I+1, \dots, I \quad (4.2)$$

Beispiel: H-Kern (Proton): $I = \frac{1}{2} \rightarrow$

$$\langle I, m_I | \hat{I}^2 | I, m_I \rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 \quad (4.3)$$

$$\langle I, m_I | \hat{I}_z | I, m_I \rangle = \pm \frac{\hbar}{2} \quad (4.4)$$

Mit Kerndrehimpuls ist magnetisches Moment verbunden:

$$\hat{\mu}_I = \frac{g_I \mu_K}{\hbar} \hat{I} \quad (4.5)$$

wobei g_I der Kern-g-Faktor ($\approx 5,6$ für Proton) und μ_K das Kernmagneton (analog zum Bohr'schen Magneton μ_B) ist. Es gilt

$$\mu_K = \frac{e}{2m_p c} \hbar \quad (4.6)$$

also

$$\mu_K = \frac{\mu_B}{1836} = 5,05 \cdot 10^{-27} \text{Am}^2 \quad (4.7)$$

Beachte: Magnetische Momente der Kerne \approx drei Größenordnungen kleiner als vom Elektron.

\rightarrow Wechselwirkungsenergie mit äußeren und inneren Feldern auch um drei Größenordnungen kleiner.

4.1.1 Hyperfein-Wechselwirkung

Wechselwirkungsenergie des magnetischen Kernmoments mit Magnetfeld B_{el} , das die Elektronen am Kernort hervorrufen:

$$\hat{H}'_I = -\hat{\mu}_I \hat{B}_{el} \quad (4.8)$$

B_{el} hat zwei Anteile:

- Durch Bahnbewegung hervorgerufenen \vec{B} -Feld
- Dipol-Dipol-Wechselwirkung der magnetischen Momente von Kern und Elektron

Man findet für $l \neq 0$ (und $r \neq 0$):

$$\hat{H}'_I = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2}{\hbar^2} g_I \mu_B \mu_K \frac{1}{r^3} \left[\hat{l} \cdot \hat{I} - \hat{s} \cdot \hat{I} \right] + 3 \frac{(\hat{s} \cdot \hat{r})(\hat{I} \cdot \hat{r})}{r^2} \quad (4.9)$$

sowie für $l = 0$

$$\hat{H}'_I = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2}{\hbar^2} g_I \mu_B \mu_K \frac{8\pi}{3} \delta(\vec{r}) \quad (4.10)$$

Beachte: \hat{H}'_I für $l = 0 \approx \delta(\vec{r})$ (Fermi-Kontakt-Wechselwirkung)

Führe ein (analog Spin-Bahn-Wechselwirkung): Gesamtdrehimpuls des Atoms:

$$\hat{F} = \hat{I} + \hat{j} \quad (4.11)$$

mit Eigenwerten

$$F(F+1)\hbar^2 \quad \text{und} \quad m_F \hbar \quad (4.12)$$

mit $m_F = -F, -F+1, \dots, F$.

Man kann zeigen: \hat{H}'_I ist diagonal in F-Basis.

→ Berechne Energieverschiebungen mittels Störungsrechnung 1. Ordnung mit Zuständen $|l, s, j, I, F, m_F\rangle$.

Man findet

$$\Delta E_I = \frac{C}{2} [F(F+1) - I(I+1) - j(j+1)] \quad (4.13)$$

mit

$$C = \frac{\mu_0}{4\pi} 4g_I \mu_B \mu_K \frac{1}{j(j+1)(2l+1)} \frac{Z^3}{a_r^3 n^3} \quad (4.14)$$

Beachte:

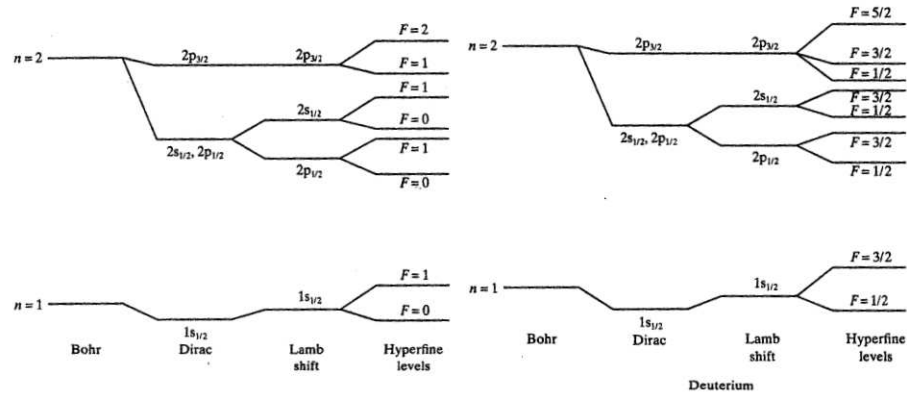
- Für gegebenen Kern mit I spaltet Feinstruktur-Niveau mit Werten l und j in Hyperfeinstruktur-Komponenten auf, die mit F benannt werden.
- ΔE_I hängt nicht von m_F ab → Hyperfein-Energie-Niveaus sind $(2F+1)$ -fach entartet.
- Mögliche Werte von F : $|I-j|, |I-j|+1, \dots, I+j$ → Zahl der Hyperfeinstruktur-Komponenten zu gegebenen Feinstruktur-Energie-Niveaus

$$\min \{(2j+1), (2I+1)\} \quad (4.15)$$

- Die Größe C aus (4.14) ist unabhängig von F → Energieabstand zwischen benachbarten Hyperfein-Niveaus (Hyperfein-Aufspaltung)

$$\Delta E_I(F) - \Delta E_I(F-1) = C \cdot F \quad (\text{Intervallregel}) \quad (4.16)$$

Niveaueverschiebungen und –aufspaltungen im H- & D-Atom



Bransden & Joachain, Physics of Atoms and Molecules, Prentice Hall

4.2 Isotopieverschiebung

Verursacht durch zwei Effekte:

- Masseneffekt: unterschiedliche Kernmassen \rightarrow bei leichten Atomen dominant
- Volumeneffekt: unterschiedliche Ladungsverteilungen des Kerns \rightarrow bei großen Kernladungszahlen dominant

4.2.1 Masseneffekt

Erinnerung: reduzierte Masse

$$m_r = \frac{m_0 M_K}{m_0 + M_K} \quad (4.17)$$

Energieeigenwerte aus (2.34):

$$E_n = -\frac{1}{2} m_r c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}$$

Beispiel: H- und D-Atom:

$$m_r^H = \frac{m_0 m_p}{m_0 + m_p}$$

$$m_r^D = \frac{m_0(m_p + m_n)}{m_0 + m_p + m_n}$$

$$\rightarrow \frac{m_r^H}{m_r^D} = \frac{E_n^H}{E_n^D} \approx 1,00027$$

Allgemein für zwei Kerne mit A und $A + 1$:

$$M_K = Am_n$$

$$M'_K = (A + 1)m_n \quad (4.18)$$

$$\frac{m_r}{m'_r} \approx 1 - \frac{1}{A(A + 1)} \frac{m_0}{m_n}$$

Damit ist die relative Verschiebung

$$\frac{\Delta E}{E} \approx \frac{1}{A^2} \cdot \frac{1}{1836} \quad (4.19)$$

4.2.2 Volumeneffekt

Pauli und Peierls 1931: Unterschied des Kernvolumens von Isotopen \rightarrow Isotopieverschiebung

Protonen in endlichem Kernvolumen verteilt \rightarrow elektromagnetisches Potential weicht ab von $\frac{1}{r}$ \rightarrow Effekt abhängig von Protonenverteilung innerhalb des Kerns

Modell: Kern \rightarrow homogen geladene Kugel mit Radius r_0

$$\rightarrow V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} & \text{für } r \geq r_0 \\ \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2r_0} \left[\left(\frac{r}{r_0}\right)^2 - 3 \right] & \text{für } r < r_0 \end{cases} \quad (4.20)$$

Störoperator $\hat{=}$ Abweichung vom reinen Coulomb-Potential

$$\rightarrow \hat{H}'_V = \begin{cases} 0 & \text{für } r \geq r_0 \\ \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2r_0} \left(\left(\frac{r}{r_0}\right)^2 + \frac{2r_0}{r} - 3 \right) & \end{cases} \quad (4.21)$$

Energieverschiebung mittels Störungsrechnung 1. Ordnung

$$\Delta E_V = \langle \psi_{n,l,m} | \hat{H}'_V | \psi_{n,l,m} \rangle$$

$$= \langle l, m | l, m \rangle \int dr |R_{n,l}(r)|^2 \hat{H}'_V \quad (4.22)$$

$$\approx \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{r_0^2}{10} |R_{n,l}(0)|^2$$

wobei im letzten Schritt $r < r_0 \rightarrow R_{n,l}(r) \approx R_{n,l}(0)$ verwendet wurde.

Beachte:

- $R_{n,l}(0) = 0$ für $l > 0 \rightarrow \Delta E_V \approx 0$ für $l \neq 0$

- Es gilt

$$|R_{n,0}(0)|^2 = \frac{4Z^3}{a_r^3 n^3} \quad (4.23)$$

$$\rightarrow \Delta E_V \approx \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2r_0^2}{5} \frac{Z^4}{a_r^3 n^3} \quad (4.24)$$

- $\Delta E_V \uparrow$ für $Z \uparrow$
 $\Delta E_V \downarrow$ für $n \uparrow$
 $\Delta E_V \uparrow$ für $a_r \downarrow$

- Für „normale“ Atome ist ΔE_V am größten für den Grundzustand von H-ähnlichen Atomen mit großem Z

$$\frac{\Delta E_V}{E_{1s}} = \frac{4Z^4}{5} \frac{r_0^2}{a_r^2} \approx Z^4 \propto 5,4 \cdot 10^{-10} \quad (4.25)$$

- Für exotische Atome kann a_r deutlich kleiner sein (z.B. Faktor ≈ 200 für myonische Atome wie myonischen Wasserstoff p_μ^-) \rightarrow erheblich verstärkter Volumeneffekt

Kapitel 5

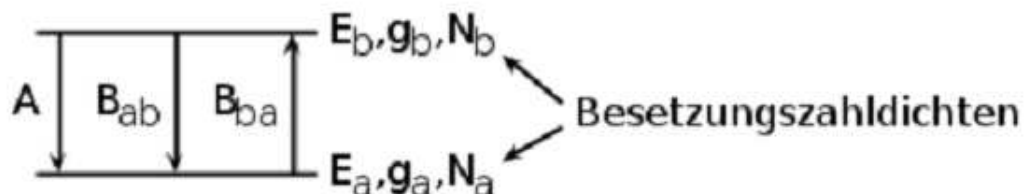
Strahlungsübergänge

Im Folgenden: Schwache Kopplung zwischen Atomen und Feld \rightarrow Betrachte Atom als vom Strahlungsfeld unabhängige Einheit.

- Gesamtwellenfunktion separiert: $\psi_{Atom+Feld} = \psi_{Atom} \cdot \psi_{Feld}$
- ψ_{Atom} kann im Rahmen der gebundenen Zustände beschrieben werden

5.1 Einsteins A- und B-Koeffizienten

Betrachte Übergänge zwischen zwei Energieniveaus E_a und E_b (g_a - und g_b -fach entartet) unter Absorption und Emission von Strahlung mit Frequenz $h\nu = E_b - E_a$ mit ($E_b > E_a$)



Einstein postulierte drei Strahlungsprozesse:

- spontane Emission:
$$\dot{N}_b \sim -N_b \tag{5.1}$$

- Absorption:
$$\dot{N}_b \sim \rho(\nu)N_a \tag{5.2}$$

wobei $\rho(\nu)$ die spektrale Energiedichte der Strahlung ist.

- induzierte Emission:

$$\dot{N}_b \sim -\rho(\nu)N_b \quad (5.3)$$

Gesamte zeitliche Änderung von N_b :

$$-\dot{N}_b = \dot{N}_a = AN_b - B_{ba}\rho(\nu)N_a + B_{ab}\rho(\nu)N_b \quad (5.4)$$

mit $N_b + N_a = N = \text{const.}$ Ohne Strahlungsfeld ($\rho = 0$) erhalten wir:

$$N_b(t) = -N_b(0)\exp(-At) \quad (5.5)$$

→ $A = \frac{1}{\tau}$ mit $\tau =$ mittlere Lebensdauer bei spontanem Zerfall

Definiere Übergangsraten (pro) für Emission W_{ab} und Absorption W_{ba} mittels

$$-\dot{N}_b = W_{ab}N_b - W_{ba}N_a \quad (5.6)$$

also

$$W_{ab} = A + B_{ab}\rho(\nu) \quad (5.7)$$

und

$$W_{ba} = B_{ba}\rho(\nu) \quad (5.8)$$

Stationärer Zustand $\dot{N}_b = 0$:

$$\rightarrow \frac{W_{ba}}{W_{ab}} = \frac{N_b}{N_a} = \frac{B_{ba}\rho(\nu)}{A + B_{ab}\rho(\nu)} \quad (5.9)$$

Bestimme $A : B_{ba} : B_{ab}$ aus Spezialfall des thermischen Gleichgewichts

$$\frac{N_b}{N_a} = \frac{g_b}{g_a} \exp\left[-\frac{(E_b - E_a)}{kT}\right] = \frac{g_b}{g_a} \exp\left(\frac{-h\nu}{kT}\right) \quad (5.10)$$

und

$$\rho(\nu) = \frac{8\pi^2\nu^2}{c^3} h\nu \left[\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (5.11)$$

Gültigkeit von Gleichungen (5.9) - (5.11) für alle T nur möglich, wenn

$$g_a B_{ba} = g_b B_{ab} \quad (5.12)$$

$$A = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} h\nu B_{ab} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} h\nu \frac{g_a}{g_b} B_{ba} \quad (5.13)$$

5.2 Übergangsraten

Betrachte: schwache Kopplung zwischen Atom und Feld

- beschreibe Wechselwirkung mit zeitabhängiger Störungstheorie. Hier verwenden wir ein halbklassisches Verfahren: quantisiertes Atom, klassisches Strahlungsfeld

- korrekte Beschreibung der Absorption und induzierten Emission, aber spontane Emission ist nicht enthalten (muss postuliert und (5.13) ausgerechnet werden) Beschreibe Feld durch Skalar- und Vektorpotential

$$\begin{aligned}\vec{E} &= -\vec{\nabla}\phi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} \\ \vec{B} &= \vec{\nabla} \times \vec{A}\end{aligned}\quad (5.14)$$

- modifizierter Hamiltonoperator des H-Atoms:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0}(\hat{p} - e\vec{A})^2 + e\phi + V \quad (5.15)$$

Schreibe $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ mit $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V$ und behandle \hat{H}' als Störung.

- wähle Coulomb-Eichung $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ und vernachlässige Term \vec{A}^2 (schwache Kopplung)

$$\rightarrow \hat{H}' = -i\hbar \frac{e}{m_0} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} = \frac{e}{m_0} \vec{A} \cdot \hat{p} \quad (5.16)$$

Entwickle Wellenfunktion des Atoms nach stationären Zuständen

$$\psi = \sum_k c_k \psi_k \exp\left(-\frac{iE_k t}{\hbar}\right) \quad (5.17)$$

mit $\hat{H}_0 \psi_k = E_k \psi_k$

Einsetzen in SG und Projektion auf ψ_b

$$\rightarrow \dot{c}_b(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_k \hat{H}'_{bk}(t) c_k(t) \exp(i\omega_{bk} t) \quad (5.18)$$

mit

$$\hat{H}'_{bk}(t) = \langle \psi_b | \hat{H}'(t) | \psi_k \rangle = \int \psi_b^*(\vec{r}) \hat{H}'(t) \psi_k(\vec{r}) d^3r \quad (5.19)$$

und $\omega_{bk} = \frac{E_b - E_k}{\hbar}$

Annahme: Atom anfangs in ψ_a und $\hat{H}'(t)$ wird zum Zeitpunkt $t = 0$ eingeschaltet, d.h. $c_k(t \leq 0) = \delta_{ka}$

Wir finden in 1. Ordnung in \hat{H}' :

$$\begin{aligned}c_b^{(1)} &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \hat{H}'_{ba}(t') \exp(i\omega_{ba} t') dt' \\ &= \frac{1}{i\hbar} \frac{e}{m_0} \int_0^t \langle \psi_b | \vec{A} \cdot \vec{p} | \psi_a \rangle \exp(i\omega_{ba} t') dt'\end{aligned}\quad (5.20)$$

Feld $\hat{=}$ Überlagerung von ebenen Wellen der Form

$$A(\vec{r}, t) = \vec{\varepsilon} A_0 \{ \exp [i (\vec{k} \vec{r} - \omega t)] + \exp [-i (\vec{k} \vec{r} - \omega t)] \} \quad (5.21)$$

Einsetzen in (5.20) liefert:

$$\begin{aligned} C_b^{(1)}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \frac{e}{m_0} A_0 \{ \langle \psi_b | e^{i\vec{k}\vec{r}} \vec{\varepsilon} \hat{p} | \psi_a \rangle \int_0^t e^{i(\omega_{ba}-\omega)t'} dt' \\ &\quad + \langle \psi_b | e^{-i\vec{k}\vec{r}} \vec{\varepsilon} \hat{p} | \psi_a \rangle \int_0^t e^{i(\omega_{ba}+\omega)t'} dt' \} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \frac{e}{m_0} A_0 \{ \langle \psi_b | e^{i\vec{k}\vec{r}} \vec{\varepsilon} \hat{p} | \psi_a \rangle \frac{e^{i(\omega_{ba}-\omega)t} - 1}{i(\omega_{ba} - \omega)} \\ &\quad + \langle \psi_b | e^{-i\vec{k}\vec{r}} \vec{\varepsilon} \hat{p} | \psi_a \rangle \frac{e^{i(\omega_{ba}+\omega)t} - 1}{i(\omega_{ba} + \omega)} \} \end{aligned} \quad (5.22)$$

Betrachte den Fall $E_b > E_a$ (Absorption):

Energieerhaltung $\rightarrow \omega_{ba} \sim \omega \rightarrow$ vernachlässige $\frac{1}{\omega_{ba}+\omega}$ gegen $\frac{1}{\omega_{ba}-\omega}$

$$\rightarrow |c_b^{(1)}(t)|^2 = \left(\frac{e}{m_0} \right)^2 A_0^2 |\langle \psi_b | e^{i\vec{k}\vec{r}} \vec{\varepsilon} \hat{p} | \psi_a \rangle|^2 \cdot \frac{\sin^2(\frac{\omega_{ba}-\omega}{2} t)}{\hbar^2 (\frac{\omega_{ba}-\omega}{2})^2} \quad (5.23)$$

Spektrale Energiedichte gegeben durch $A_0(\omega)$:

$$\rho(\omega) = \frac{1}{2} \varepsilon_0 E^2(\omega) = 2\varepsilon_0 \omega^2 A_0^2(\omega) \quad (5.24)$$

Integriert über alle Frequenzen erhalten wir also unter Vernachlässigung von Interferenztermen (inkohärente Strahlung):

$$\begin{aligned} |c_b^{(1)}(t)|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{|\vec{\varepsilon} \langle \psi_b | e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{p} | \psi_a \rangle|^2}_{\text{ändert sich langsam mit } \omega_{ba}} \frac{\rho(\omega_{ba})}{2\varepsilon_0 \omega^2} \underbrace{\frac{\sin^2(\frac{\omega_{ba}-\omega}{2} t)}{\hbar^2 (\frac{\omega_{ba}-\omega}{2})^2}}_{\text{stark gepeakt für } \omega_{ba}=\omega} d\omega \\ &\approx \pi \left(\frac{e}{m_0} \right)^2 \frac{1}{\varepsilon_0 \hbar^2 \omega_{ba}^2} |\vec{\varepsilon} \langle \psi_b | e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{p} | \psi_a \rangle|^2 \rho(\omega_{ba}) t \end{aligned} \quad (5.25)$$

Für die Übergangsrate erhält man schließlich:

$$W_{ba} = \frac{d}{dt} |c_b^{(1)}(t)|^2 = \pi \left(\frac{e}{m_0} \right)^2 \frac{1}{\varepsilon_0 \hbar^2 \omega_{ba}^2} |\vec{\varepsilon} \langle \psi_b | e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{p} | \psi_a \rangle|^2 \rho(\omega_{ba}) \quad (5.26)$$

Bemerkungen:

- (5.26) beschreibt Absorption ($E_b > E_a$).

Für induzierte Emission vertausche a und b und ersetze $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ durch $e^{-i\vec{k}\vec{r}}$

- (5.26) gilt für polarisierte Strahlung. Unpolarisierte Strahlung \rightarrow statistische Orientierung zwischen $\vec{\varepsilon}$ und \vec{p} \rightarrow gemitteltetes Skalarprodukt ergibt zusätzlichen Faktor $\frac{1}{3}$
- Vergleiche (5.26) für unpolarisierte Strahlung mit (5.8):

$$B_{ba} = \frac{1}{6} \left(\frac{e}{m_0} \right)^2 \frac{1}{\varepsilon_0 \hbar^2 \omega_{ba}^2} |\langle \psi_b | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \hat{p} | \psi_a \rangle|^2 \quad (5.27)$$

- $|c_b^{(1)}(t)|^2$ wird nur dann groß, wenn die Energie gemäß $h\nu = E_b - E_a$ erhalten ist.
- $W_{ba} \propto$ Quadrat des Matrixelementes der Störung, die die Zustände a und b koppelt:

$$|M_{ba}|^2 \propto |\vec{\varepsilon} \langle \psi_b | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \hat{p} | \psi_a \rangle|^2 \quad (5.28)$$

- M_{ba} bestimmt die Auswahlregeln für den Übergang zwischen den Zuständen a und b
- Auftreten von Nichtdiagonalelementen $\Leftrightarrow \hat{H}$ ist nicht diagonal in der Basis der ψ_k ($\hat{H}\psi_k = E_k\psi_k$) \Leftrightarrow stationäre Zustände mischen durch Anschalten des Feldes.

5.3 Die elektrische Dipolnäherung

Ortsabhängigkeit der einfallenden Welle in (5.28) \Leftrightarrow Faktor $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$. Es ist $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ und $|\vec{r}| \approx \frac{a_0}{Z}$, also

$$\begin{aligned} \vec{k} \cdot \vec{r} &\approx \frac{2\pi}{\lambda} \frac{a_0}{Z} = \frac{a_0}{Z\hbar c} (E_j - E_i) < \frac{a_0}{Z\hbar c} \underbrace{\frac{1}{2} \frac{Z^2 e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{a_0}}_{-E_1} \\ &= \frac{Z\alpha}{2} = \frac{1}{274} \end{aligned} \quad (5.29)$$

Folglich gilt:

$$\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) = 1 + (i\vec{k} \cdot \vec{r}) + \frac{1}{2!} (i\vec{k} \cdot \vec{r})^2 + \dots \approx 1 \quad (5.30)$$

Physikalische Bedeutung:

Dipol-Näherung \Leftrightarrow vernachlässige räumliche Änderung des Strahlungsfeldes über die Größe des Atoms (gültig falls $\lambda \gg a_0$).

Man erhält

$$M_{ba}^D = \frac{i}{\hbar} \vec{\varepsilon} \langle \psi_b | \hat{p} | \psi_a \rangle = \frac{im_0}{\hbar} \vec{\varepsilon} \langle \psi_b | \hat{r} | \psi_a \rangle \quad (5.31)$$

Operator-Schrödingergleichung:

$$\hat{r} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{r}, \hat{H}_0] \quad (5.32)$$

Man beachte, dass hier nicht \hat{H} steht, da es sich um Störungsrechnung handelt.

Aus dem Vorangegangenen folgt daher

$$\begin{aligned}\langle \psi_b | \dot{\hat{r}} | \psi_a \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_b | \hat{r} \hat{H}_0 - \hat{H}_0 \hat{r} | \psi_a \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} (E_a - E_b) \langle \psi_b | \hat{r} | \psi_a \rangle \\ &= i\omega_{ba} \langle \psi_b | \hat{r} | \psi_a \rangle\end{aligned}\quad (5.33)$$

Einsetzen in (5.31) liefert

$$M_{ba}^D = -\frac{m_0 \omega_{ba}}{\hbar} \vec{\varepsilon} \vec{r}_{ba} \quad (5.34)$$

mit $\vec{r}_{ba} = \langle \psi_b | \hat{r} | \psi_a \rangle$.

Definiere Operator des elektrischen Dipolmoments

$$\hat{D} := -e\hat{r} \quad (5.35)$$

mit Matrixelement $\vec{D}_{ba} = -e\vec{r}_{ba}$

Damit folgt

$$M_{ba} = \frac{m_0 \omega_{ba}}{\hbar e} \vec{\varepsilon} \vec{D}_{ba} \quad (5.36)$$

und

$$W_{ba}^D = \frac{4\pi^2}{\hbar} \left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \right) |\vec{\varepsilon} \vec{D}_{ba}|^2 \rho(\omega_{ba}) \quad (5.37)$$

Bemerkungen:

- $\vec{\varepsilon} \vec{D}_{ba} \hat{=}$ Matrixelement der Komponente des elektrischen Dipolmoments zwischen Zuständen a und b in Richtung der Polarisation $\vec{\varepsilon}$
- Ist $\vec{D}_{ba} \neq 0$, so nennt man $a \leftrightarrow b$ einen erlaubten Übergang oder einen elektrischen Dipolübergang (E1). Für $\vec{D}_{ba} = 0$ nennt man $a \leftrightarrow b$ einen verbotenen Übergang.
- Für verbotene Übergänge können höhere Terme in (5.30) zu $W_{ba} \neq 0$ führen ($i\vec{k} \vec{r} \leftrightarrow$ magnetischer Dipolübergang (M1) und elektrischer Quadrupolübergang (E2)). Die Raten dieser Übergänge sind viel kleiner als für erlaubte Übergänge.
- Verschwindet das angenäherte Matrixelement (5.28), so ist der Übergang in 1. Ordnung Störungstheorie ein strikt verbotener Übergang.
 \Rightarrow Übergänge nur durch Prozesse höherer Ordnung (zwei-Photonen-Übergänge, ...) \Rightarrow berücksichtigte Term $\frac{e^2 \vec{A}^2}{2m_0}$ in \hat{H}'
- (5.37) beschreibt auch die Rate der stimulierten Emission: $W_{ba} = W_{ab}$, da $M_{ab} = -M_{ba}^*$ und folglich $|M_{ab}|^2 = |M_{ba}|^2$

Einstein-Koeffizienten in Dipolnäherung Aus (5.37) für unpolarisierte Strahlung erhalten wir

$$B_{ba} = \frac{W_{ba}}{2\pi\rho(\omega_{ba})} = \frac{2\pi}{3\hbar^2} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) |D_{ba}|^2 \quad (5.38)$$

und mit

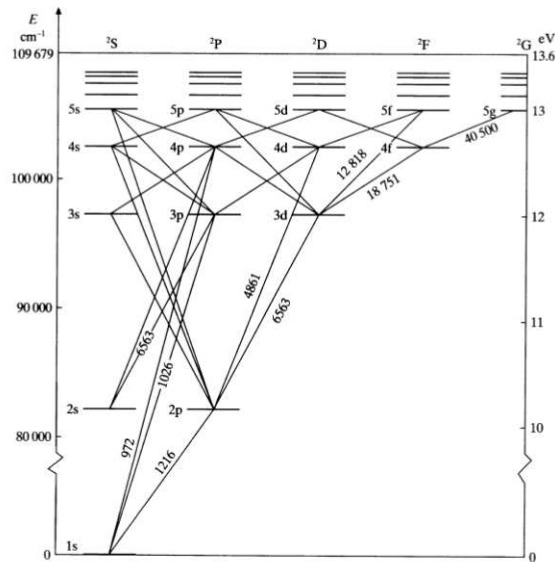
$$A_{ab} = \frac{8\pi\nu_{ab}^2}{c^3} h\nu_{ab} B_{ab} = \frac{2\omega_{ab}^3 \hbar}{\pi c^3} B_{ba}$$

finden wir

$$A_{ab} = \frac{4}{3\hbar c^3} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \omega_{ab}^3 |D_{ba}|^2 \quad (5.39)$$

Beachte: spontane Emissionsrate $a \approx \omega_{ab}^3 |D_{ba}|^2$

Dipolübergänge im H-Atom



Bransden & Joachain, Physics of Atoms and Molecules, Prentice Hall

5.4 Auswahlregeln für l und m_l

Betrachte Erwartungswert des Dipoloperators für stationäre Zustände ψ_{n,l,m_l}

$$\langle -e\hat{r} \rangle_{n,l,m_l} = -e \int \psi_{n,l,m_l}^* \vec{r} \psi_{n,l,m_l} d^3 \vec{r} \quad (5.40)$$

ψ_{n,l,m_l} hat definierte Parität: $P\psi_{n,l,m_l} = (-1)^l \psi_{n,l,m_l}$

$$\Rightarrow P\psi_{n,l,m_l}^* \psi_{n,l,m_l} = \psi_{n,l,m_l}^* \psi_{n,l,m_l} \text{ aber } P\vec{r} = -\vec{r}$$

$$\Rightarrow \langle -e\hat{r} \rangle_{n,l,m_l} = 0 \quad (5.41)$$

\Rightarrow Atom hat kein permanentes Dipolmoment (folgt auch aus der Zeitumkehrinvarianz).

Im Folgenden: Betrachte z-Achse als physikalisch ausgezeichnet und kartesische Koordinaten von \vec{r} getrennt.

(a) $z = r \cos(\theta)$

$$\begin{aligned} \langle n', l', m'_l | z | n, l, m_l \rangle &\approx \int_0^\infty R_{n',l'}^* r R_{n,l} r^2 dr \\ &\int_0^\pi P_{l'}^{m'_l} \cos(\theta) P_l^{m_l} \sin(\theta) d\theta \\ &\int_0^{2\pi} e^{-im'_l\varphi} e^{im_l\varphi} d\varphi \\ &= 0 \\ &\text{au\ss}er \text{ f\"ur } m'_l = m_l \end{aligned} \quad (5.42)$$

(b) $x = r \sin(\theta) \cos(\varphi)$

$$\begin{aligned} \langle n', l', m'_l | x | n, l, m_l \rangle &\sim \int_0^{2\pi} e^{-im'_l\varphi} \cos(\varphi) e^{im_l\varphi} d\varphi \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \{ \exp[i(m_l - m'_l + 1)\varphi] + \exp[i(m_l - m'_l - 1)\varphi] \} d\varphi \\ &= 0 \text{ au\ss}er \text{ f\"ur } m_l = m'_l \pm 1 \end{aligned} \quad (5.43)$$

(c) $y = r \sin(\theta) \sin(\varphi) \Rightarrow$ wie (b)

(a) bis (c): Polarisationsauswahlregeln f\"ur elektrische Dipolstrahlung:

- $\Delta m_l = 0$ falls $\vec{\epsilon} \parallel$ Quantisierungsachse (π -Polarisation)
- $\Delta m_l = \pm 1$ falls $\vec{\epsilon} \perp$ Quantisierungsachse (σ -Polarisation)

Auswahlregeln f\"ur l :

- Symmetriebetrachtung $\rightarrow \Delta l$ muss ungerade sein, damit $P\psi_{n',l',m'_l}^* \vec{r} \psi_{n,l,m_l} = \psi_{n',l',m'_l}^* \vec{r} \psi_{n,l,m_l}$

Betrachte θ -Abhängigkeit:

Es gilt

$$\cos(\theta) P_l^{m_l} = \frac{(l - m_l + 1)P_{l+1}^{m_l} + (l + m_l)P_{l-1}^{m_l}}{2l + 1} \quad (5.44)$$

Für die z-Komponente folgt mit Hilfe der Orthogonalität der $P_l^{m_l}$

$$\int_0^\pi P_{l'}^{m_{l'}} \cos(\theta) P_l^{m_l} \sin\theta \, d\theta = 0 \text{ außer für } l' = l \pm 1 \quad (5.45)$$

Für x- und y-Komponente nutzen wir entsprechend

$$\sin(\theta) P_l^{m_l-1} = \frac{P_{l+1}^{m_l} - P_{l-1}^{m_l}}{2l + 1} \rightarrow \text{ebenfalls } l' = l \pm 1 \quad (5.46)$$

Schließlich: Relative Intensitäten der Linien, die bei spontaner Emission auf Grund der Auswahlregeln für $E1$ -Übergänge erlaubt sind, sind proportional zu (vgl. (5.39)):

$$\hbar\omega^3 \left[\int R_{n',l'} r R_{n,l} r^2 \, dr \right] \cdot F(l, m_l, l', m_{l'}) \quad (5.47)$$

$F(l, m_l, l', m_{l'})$ nur abhängig von Winkelanteil \rightarrow kann für H-Atom bzw. beliebiges Zentralpotential allgemeingültig berechnet werden.

Beachte:

- Radialintegral muss im Allgemeinen mit Hilfe der Radialwellenfunktion berechnet werden
- Es gibt keine Auswahlregeln für n !

Kapitel 6

Zwei-Elektronen-Atome

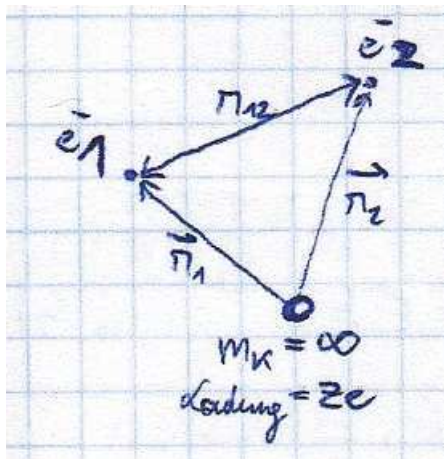
Betrachte Atom/Ion mit Kern (Ladung Ze) und 2 Elektronen, d.h. H^- ($Z = 1$), He ($Z = 2$), Li^+ ($Z = 3$) usw.

Problem: Behandlung nicht exakt möglich. \Rightarrow Berücksichtige nur elektrostatische Wechselwirkung und vernachlässige (kleine) relative Korrekturterme (Spin-Bahn-, Spin-andere-Bahn-, Spin-Spin-, Bahn-Bahn-Wechselwirkung).

Beachte: Selbst mit dieser Näherung ist das Problem nur näherungsweise lösbar.

6.1 Schrödingergleichung für Zwei-Elektron-Atom

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \vec{\nabla}_{r_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_0} \vec{\nabla}_{r_2}^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (6.1)$$



Zwei-Elektron-Atom

Im Folgenden: Verwende atomare Einheiten (a.u.)

Längeneinheit: a_0 und $m_0 = \hbar = 4\pi\epsilon_0 = 1$

$$E_N = -\frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2} a.u.$$

\Rightarrow Grundzustand H-Atom: $-\frac{1}{2} a.u.$

Geschwindigkeitseinheit: Geschwindigkeit auf 1. Bohr'scher Bahn

$$v_0 = \alpha c \rightarrow c = 137 a.u.$$

$$\Rightarrow \left[-\frac{1}{2} \vec{\nabla}_{r_1}^2 - \frac{1}{2} \vec{\nabla}_{r_2}^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (6.2)$$

Beachte:

- (6.2) ist wegen $\frac{1}{r_{12}}$ nicht separabel
- $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ ist kein Produkt von Ein-Teilchen-Wellenfunktionen
- $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ beschreibt einen verschränkten Zustand
- (6.2) ist invariant unter Austausch der Elektronenindizes (Austauschoperator P_{12})
 - Die Wellenfunktion $\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = P_{12} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ und $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ erfüllen die Schrödingergleichung mit gleichem Eigenwert E (Anm.: E ist nicht entartet)
 - $\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = P_{12} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \lambda \psi$
 - $P_{12}^2 = \mathbb{1} \Rightarrow \lambda^2 = 1$ also

$$\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = \pm \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (6.3)$$

- Man nennt die Wellenfunktion symmetrisch für „+“ in (6.3) und antisymmetrisch für „-“ \Rightarrow Zustände mit räumlich symmetrischer/antisymmetrischer Wellenfunktion nennt man Para-/Ortho-Zustände

6.2 Störungstheoretische Behandlung

Schreibe (6.2) in Form

$$(\hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}') \psi = E \psi \quad (6.4)$$

mit

$$\underbrace{H_{1,2} = -\frac{1}{2} \vec{\nabla}_{r_{1,2}}^2 - \frac{Z}{r_{1,2}}}_{\hat{H} \text{ für H-Atom}} \quad (6.5)$$

und

$$\hat{H}' = \underbrace{\frac{1}{r_{12}}}_{\text{„Störung“}} \quad (6.6)$$

In nullter Näherung lautet (6.4)

$$(\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\psi = E\psi \quad (6.7)$$

und wird gelöst durch

$$\psi^{(0)} = \underbrace{u_{n,l,m_l}(1)u_{n',l',m'_l}(2)}_{\text{H-Atom-Wellenfunktion}} \quad (6.8)$$

mit

$$\hat{H}_1 u_{n,l,m_l}(1) = E_n u_{n,l,m_l}$$

und

$$\hat{H}_2 u_{n',l',m'_l}(2) = E_{n'} u_{n',l',m'_l}$$

$$\Rightarrow E = E_n + E_{n'}$$

Kurz:

$$\psi^{(0)} = u_a(1)u_b(2)$$

wobei $a \hat{=} nlm_l$ und mit $E = E_a + E_b$ und $a \neq b$

Auch $P_{12}\psi^{(0)} = u_b(1)u_a(2)$ löst (6.7) mit $E = E_a + E_b \rightarrow$ Austauschentartung

Wir werden sehen: $\hat{H}' = \frac{1}{r_{12}}$ hebt Austauschentartung auf.

Noch kürzer

$$u_a(1)u_b(2) =: u_{ab}, \quad u_b(1)u_a(2) =: u_{ba} \quad (6.9)$$

Matrixelemente der Störung in Basis $\{u_{ab}, u_{ba}\}$:

$$\begin{aligned} H'_{11} &= \int u_{ab}^* H' u_{ab} d\tau = \int \frac{(-|u_a(1)|^2)(-|u_b(2)|^2)}{r_{12}} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \\ &= \int \frac{\rho_a(1)\rho_b(2)}{r_{12}} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \end{aligned} \quad (6.10)$$

und entsprechend

$$H'_{22} = \int \frac{\rho_b(1)\rho_a(2)}{r_{12}} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \quad (6.11)$$

Die Integrale (6.10) und (6.11) entsprechen der klassischen Coulombenergie zweier elektrostatischer Ladungsverteilungen (ρ_a, ρ_b) . Es gilt:

$$H'_{11} = H'_{22} =: J \quad (\text{Coulomb-Integral}) \quad (6.12)$$

$$H'_{21} = H'_{12} =: K \quad (\text{Austauschintegral}) \quad (6.13)$$

Diagonalisierung von

$$\hat{H}' = \begin{pmatrix} H'_{11} & H'_{12} \\ H'_{21} & H'_{22} \end{pmatrix}$$

liefert Eigenfunktion U von $\hat{H}_0 + \hat{H}'$ mit Energieeigenwerten $E + \Delta E$. Man findet

$$\Delta E = J \pm K \quad (6.14)$$

Für $\Delta E = J + K$ gilt

$$U_S = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_{ab} + u_{ba}) \quad (6.15)$$

Für $\Delta E = J - K$ gilt

$$U_A = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_{ab} - u_{ba}) \quad (6.16)$$

Beachte:

- U_S und U_A sind Eigenfunktionen von P_{12} :

$$P_{12}U_S = +U_S \text{ (symm.) und } P_{12}U_A = -U_A \text{ (antisymm.)} \quad (6.17)$$

- P_{12} vertauscht mit Hamiltonoperator \Rightarrow Symmetrie ist Erhaltungsgröße
- Auch unter Wechselwirkung mit Strahlungsfeldern ist Symmetrie erhalten! Matrixelement der Dipolnäherung (über gesamten Raum):

$$\begin{aligned} \int U_S^*(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)U_A d\tau &\stackrel{!}{=} \int P_{12}(U_S^*(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)U_A) d\tau \\ &= - \int U_S^*(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)U_A d\tau = 0 \end{aligned} \quad (6.18)$$

Das gilt auch für alle höheren Multipoloperatoren.

\Rightarrow elektromagnetische Übergänge zwischen Para-(symm.) und Ortho-(antisymm.)Zuständen (Interkombinationsübergänge) sind verboten.

- Interkombinationsverbot nur gültig, solange relative Effekte (Spin-Bahn-Wechselwirkung) vernachlässigbar sind, d.h. für $Z \leq 40$

6.3 Grundzustand des He-Atoms

Nullte Näherung: keine Wechselwirkung zwischen Elektronen ((6.7))

- Grundzustand \leftrightarrow beide Elektronen im H-Atom-Grundzustand mit Quantenzahlen $n_1 = 1, l_1 = 0, m_{l_1} = 0$ und $n_2 = 1, l_2 = 0, m_{l_2} = 0$
- Bezeichnung für Elektronenkonfiguration $1s^2$
- Ungestörte Energie:

$$E(1s^2) = 2E(1s) = 2 \left(-\frac{1}{2} \right) \frac{2^2}{1^2} = -4a.u. = -108.8eV \quad (6.19)$$

Berechne Effekt von $\frac{1}{r_{12}}$ mit nicht entarteter Störungstheorie:

$$E^{(1)}(1s^2) = \left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle = \frac{5}{8}Z \quad (6.20)$$

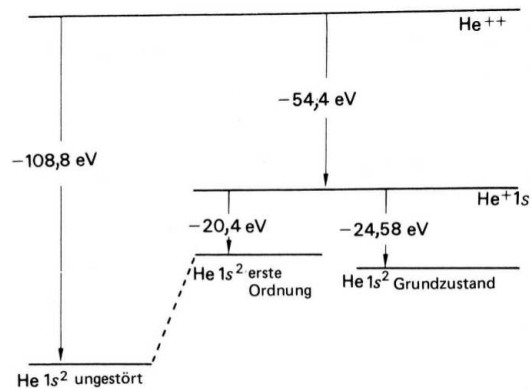
⇒ Ionisierungspotential ($He \rightarrow He^+$)

$$\begin{aligned} E_{\text{ion}}^{(1)} &= -(E(1s^2) + \Delta E(1s^2)) \\ &= \frac{1}{2} \frac{2^2}{1^2} - \frac{5}{8} \cdot 2 \\ &= \frac{3}{4} a.u. = 54,4 eV - 34 eV = 20,4 eV \end{aligned} \quad (6.21)$$

Beachte:

- Experimenteller Wert: $E_{\text{ion}}^{\text{exp}} = 24,580 eV$
- Diskrepanz von 14% zwischen $E_{\text{ion}}^{(1)}$ und $E_{\text{ion}}^{\text{exp}} \leftrightarrow \hat{H}'$ ist keine kleine Störung ($\Delta E^{(1)}(1s^2) = 34 eV$ bei Gesamtenergie $E(1s^2) = -108,8 eV$).

Grundzustand des He-Atoms



Woodgate, Elementare Struktur der Atome, R. Oldenbourg

6.4 Die angeregten Zustände des He-Atoms

Energie der angeregten Zustände des He-Atoms aus (6.4)

$$E = E_{n_1} + E_{n_2} + J \pm K \quad (6.22)$$

(Nullpunkt: Ionisierungsgrenze von He⁺). d.h. $E(\text{He}^{++})$.

Beachte:

- Gleichzeitige Anregung beider Elektronen \Rightarrow Energieniveaus oberhalb der Ionisierungsgrenze von He
- Im Folgenden angenommen: Eines der beiden Elektronen im 1s-Zustand (einfach angeregter Zustand).
- Subtrahiere $E(1s)$ von (6.22)

$$\Rightarrow E = E_n + J \pm K \quad (6.23)$$

(Nullpunkt: Ionisierungsgrenze von He)

- Die ungestörte Energie wird auf zwei Arten modifiziert
 - Verschiebung um Wert des Coulombintegrals

$$J(1s, nl) = \langle 1s, nl | \frac{1}{r_{12}} | 1s, nl \rangle \quad (6.24)$$

- Aufspaltung durch das Austauschintegral

$$K(1s, nl) = \langle 1s, nl | \frac{1}{r_{12}} | nl, 1s \rangle \quad (6.25)$$

Effekt des Coulomb-Integrals: Teilweise Kompensation der zentralen Anziehung durch Kernladung

- Führe Abschirmung ein: 1s- e^- ist nahe dem Kern konzentriert (inneres Elektron). Das nl- e^- „sieht“ eine durch 1s- e^- abgeschirmte Kernladung. Abschirmung ist umso vollständiger, je größer n und l .
- Schreibe potentielle Energietermine in Hamiltonoperator um in eine effektive Form ($\frac{1}{r_{12}}$)

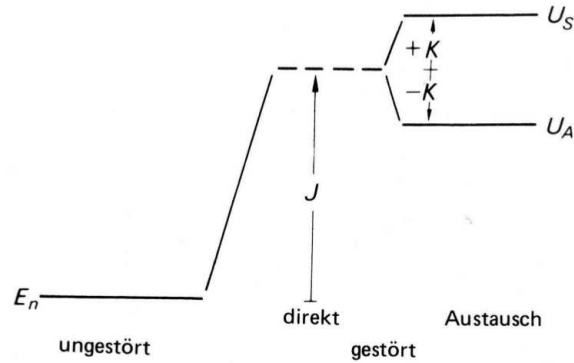
$$V = -\frac{Z}{r_{1s}} - \frac{Z-1}{r_{nl}} \quad (6.26)$$

- Für große n und l sind Energieniveaus des He-Atoms wasserstoffähnlich.

Weiterer Effekt der Coulomb-Wechselwirkung $\frac{1}{r_{12}}$: Aufhebung der l -Entartung. Anschaulicher Grund: Stärke der Abschirmung hängt ab von der Exzentrizität der Bahn des äußeren Elektrons.

Bsp.: $E_{1s2p} - E_{1s2s} \approx 7000 \text{cm}^{-1}$

Angeregte Zust. des He-Atoms



Woodgate, Elementare Struktur der Atome, R. Oldenbourg

6.4.1 Termbezeichnungen im He-Atom

Gesamtdrehimpuls:

$$\hat{L} = \hat{l}_1 + \hat{l}_2 \quad (6.27)$$

Beachte:

- \hat{L}^2 und \hat{L}_z sind auch unter der Störung $\frac{1}{r_{12}}$ Konstanten der Bewegung, falls relative Effekte vernachlässigbar sind.
- Auch Austauschoperator vertauscht mit \hat{L}^2 und \hat{L}_z
- Für $1snl$ -Konfiguration ist $\hat{L} = \hat{l}$, da $l_1 = 0$ und $l_2 = l$ ist.

⇒ Bezeichne Terme mit Code-Buchstaben für Gesamtdrehimpuls:

Konfiguration	Term(e)
$1s^2$	1^1S
$1s2s$	$\left\{ \begin{array}{l} 2^3S \text{ (Gesamtspin } (2S+1) \text{ s.u.)} \\ 2^1S \end{array} \right.$
$1s2p$	$\left\{ \begin{array}{l} 2^3P \\ 2^1P \end{array} \right.$

Es gilt $K > 0 \Rightarrow$ Energie des antisymmetrischen Zustandes $U_A <$ Energie des symmetrischen Zustandes U_S

Anschaulicher Grund:

$$U_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0 \text{ für } \vec{r}_1 = \vec{r}_2 \text{ aber}$$

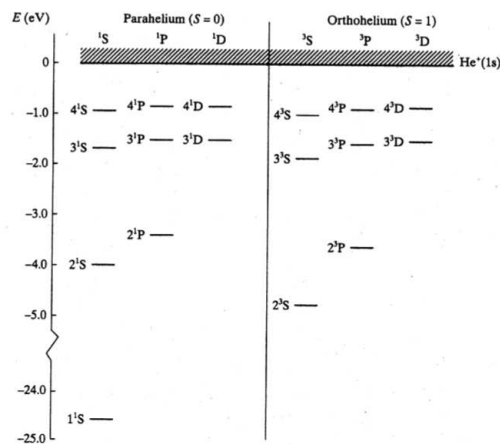
$$U_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \neq 0 \text{ für } \vec{r}_1 = \vec{r}_2$$

⇒ im Para-Zustand können sich die Elektronen sehr nahe kommen, was deren Energie erhöht (wegen Abstoßung). Damit wird auch klar: Energiedifferenz wird kleiner für wachsende n und l , weil Überlappung zwischen $1s$ - und nl -Wellenfunktion geringer ist.

Zusammenfassung Austausch-Phänomen:

Elektronen ununterscheidbar ⇒ erzwingt spezielle Form der Wellenfunktion bezüglich Austausch (symmetrisch oder antisymmetrisch). Quantenmechanischer Interferenz-Effekt bei Berechnung $\langle \frac{1}{r_{12}} \rangle$ macht Energieniveaus abhängig von Symmetrie der Wellenfunktion.

Termschema des He-Atoms



Bransden & Joachain, Physics of Atoms and Molecules, Prentice Hall

6.5 Spinfunktionen der Elektronen und Pauli-Prinzip

Annahme: keine Wechselwirkung zwischen Spin- und Ortskoordinaten.

⇒ Einelektronenwellenfunktionen separieren in Spin- und Ortskoordinaten

⇒ Schreibe kombinierte Orts- und Spinfunktionen als Produkt:

$$\psi(1) = u_{n,l,m_l}(1)\chi_{\pm}(1) \quad (6.28)$$

mit

$$\hat{S}_1^2 \chi_{\pm}(1) = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_{\pm}(1) \quad (6.29)$$

und

$$\hat{S}_{1,z} \chi_{\pm}(1) = \pm \frac{\hbar}{2} \chi_{\pm}(1) \quad (6.30)$$

Zwei Elektronen ⇒ Produkte von Spinfunktionen $\chi_{\pm}(1)\chi_{\pm}(2)$ (4 Kombinationen ⇒ 4 Funktionen)

Wähle Darstellung, in der die Funktionen Eigenfunktionen von

$$\hat{S}^2 = (\hat{s}_1 + \hat{s}_2)^2$$

mit Eigenwert $S(S+1)\hbar^2$ und von

$$\hat{S}_Z = (\hat{s}_{1,Z} + \hat{s}_{2,Z})$$

mit Eigenwert $M_s\hbar$ sind:

$$\chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2)] \quad S = M_s = 0 \quad (6.31)$$

$$\chi_s = \begin{cases} \chi_+(1)\chi_+(2) & (S = 1 \quad M_s = 1) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_-(1)\chi_+(2)] & (S = 1 \quad M_s = 0) \\ \chi_-(1)\chi_-(2) & (S = 1 \quad M_s = -1) \end{cases} \quad (6.32)$$

Beachte:

- \hat{S}^2 und \hat{S}_z vertauschen mit Hamiltonoperator in (6.1) und mit P_{12}
- \hat{S}^2 und \hat{S}_z sind Konstanten der Bewegung und χ_A und χ_S haben definierte Austauschsymmetrie

$$P_{12}\chi_A = -\chi_A \quad \text{und} \quad P_{12}\chi_s = \chi_s \quad (6.33)$$

- Man nennt die χ_A Singulett-Funktionen und die χ_S Triplett-Funktionen (dreifach entartet in M_s)

Betrachte kombinierte Orts- und Spinwellenfunktionen:

4 Kombinationen, von denen:

$$\psi_S = \begin{cases} U_s \chi_s \\ U_A \chi_A \end{cases}$$

vollständig symmetrisch bezüglich Spin- und Ortskoordinaten sind und

$$\psi_A = \begin{cases} U_s \chi_A \\ U_A \chi_s \end{cases}$$

vollständig antisymmetrisch sind.

Pauli-Prinzip: Für Elektronen sind nur Wellenfunktionen erlaubt, die vollständig antisymmetrisch sind:

$\Rightarrow U_S$ tritt nur mit χ_A auf \Rightarrow Singulett
und U_A tritt nur mit χ_s auf \Rightarrow Triplett

Beachte:

- Elektronen-Multipoloperatoren wirken nicht auf Spin \Rightarrow Auswahlregel:

$$\Delta S = 0 \quad (6.34)$$

- Diese Regel ist identisch mit dem schon gezeigten Interkombinationsverbots
- Triplettterm niedrigster Energie: $2^3S \Rightarrow$ metastabil (Lebensdauer ∞ in betrachteter Näherung)
- He-Grundzustand: $1^1S \Rightarrow$ Erzeugung von Triplett-Zuständen (trotz Interkombinationsverbot) erfordert spinabhängige Wechselwirkung (z.B. Stoßprozesse in einer Entladungsröhre)

Bemerkungen:

- Pauli-Prinzip koppelt Orts- und Spinkoordinaten \Rightarrow Elektronen verhalten sich, als wirke auf sie eine Kraft, die von der relativen Orientierung der Spins abhängt (Austauschkraft)
- Die Energiekorrektur (6.14) lässt sich schreiben als:

$$\begin{aligned} \Delta E &= J + \left(1 - \frac{\langle S^2 \rangle}{\hbar^2}\right) K \\ &= J - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{4\langle \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \rangle}{\hbar^2}\right) K \\ &= J - \frac{1}{2}(1 + \langle \sigma_1 \cdot \sigma_2 \rangle) K \end{aligned} \quad (6.35)$$

\Rightarrow Energieverschiebung hängt explizit von der relativen Orientierung der beiden Elektronenspins ab, obwohl Hamilton (6.1) nicht spinabhängig ist

- Austauschkraft hat gleiche Größenordnung wie die elektrostatische Kraft
- Heisenberg: Austauschkraft ist groß genug, um in bestimmten Festkörpern die Spins aneinander auszurichten \Rightarrow Ferromagnetismus

Kapitel 7

Mehrelektronen Atome

7.1 Die Zentralfeld-Näherung

Betrachte Atome/Ionen mit Kernladung Ze und $Ne^- \Rightarrow$ Hamiltonoperator in atomaren Einheiten (∞ -schwerer Kern)

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_{r_i}^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i < j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (7.1)$$

\Rightarrow Schrödingergleichung für Ortswellenfunktion

$$\hat{H}\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = E\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad (7.2)$$

Schrödingergleichung nicht separabel wegen $\frac{1}{r_{ij}}$ (wie beim He). Aber: $\sum \frac{1}{r_{ij}}$ hat gleiche Größenordnung wie $\frac{Z}{r_i}$ und kann nicht als Störung betrachtet werden.

Idee (Hartree, Fock, Slater): Definiere (einfachen) neuen ungestörten Hamiltonoperator der sphärisch symmetrischen Komponente $\sum_i S(r_i)$ (und damit größten

Teil) der Elektronen-Abstoßung beinhaltet.

\Rightarrow Jedes Elektron bewegt sich in erster Näherung in effektivem Potential

$$V(r) = -\frac{Z}{r} + S(r) \quad (7.3)$$

Asymptotisches Verhalten von $V(r)$ (analog zu He):

$$\begin{aligned} V(r) &\rightarrow -\frac{Z}{r} \quad \text{für } r \rightarrow 0 \\ V(r) &\rightarrow -\frac{Z - N + 1}{r} \quad \text{für } r \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (7.4)$$

Genauere Form für $0 < r < \infty$ komplizierter (später).

Schreibe Hamiltonoperator :

$$\hat{H} = \hat{H}_c + \hat{H}_1 \quad (7.5)$$

\hat{H}_c : ungestörter Zentralfeld-Hamiltonoperator, d.h.

$$\hat{H}_c = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \vec{\nabla}_{r_i}^2 + V(r_i) \right) = \sum_{i=1}^N \hat{h}_i \quad (7.6)$$

\hat{H}_1 : Störung \leftrightarrow verbleibender sphärischer und alle nicht sphärischen Anteile von $\sum \frac{1}{r_{ij}}$

Störungsansatz: Vernachlässige \hat{H}_1 und löse Schrödingergleichung für $\hat{H}_C \rightarrow N e^-$ Zentralfeld-Wellenfunktion $\psi_C(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ mit

$$\hat{H}_C \psi_c = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \vec{\nabla}_{r_i}^2 + V(r_i) \right) \psi_c = E \psi_c \quad (7.7)$$

Beachte:

- (7.7) separiert in N Einelektronen-Gleichungen \Rightarrow

$$\psi_c = u_{a_1}(\vec{r}_1) u_{a_2}(\vec{r}_2) \dots u_{a_n}(\vec{r}_n) \quad (7.8)$$

$u_{a_1} \dots u_{a_n}$: (normierte) Einelektronenorbitale mit

$$\left[-\frac{1}{2} \vec{\nabla}_r^2 + V(r) \right] u_{n,l,m_l}(\vec{r}) = E_{n,l} u_{n,l,m_l}(\vec{r}) \quad (7.9)$$

und $a_i = (n_i, l_i, m_{l_i})$.

- $V(r)$ Zentralpotential $\Rightarrow u_{n,l,m_l}(\vec{r}) = R_{n,l} Y_l^{m_l}(\theta, \varphi)$ mit

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{n,l}(r) + V(r) R_{n,l}(r) = E_{n,l} R_{n,l}(r) \quad (7.10)$$

und $n = 1, 2, \dots$; $l = 0, 1, \dots, n-1$ $m_l = -l, -l+1, \dots, l$

- Gesamtenergie in Zentralfeld-Näherung $E_c = \sum_{i=1}^N E_{n_i, l_i}$
- Austauschentartung: Permutation der Elektronen-Koordinaten in ψ_c löst weiterhin (7.7) und lässt E_c unverändert.

7.2 Spinfunktionen und Pauli-Prinzip

Berücksichtige Spin durch Multiplikation der Einelektronenorbitale mit (normierten) Spinfunktionen:

$$u_{n,l,m_l,m_s}(q) = u_{n,l,m_l}(\vec{r}) \chi_{\frac{1}{2},m_s} \quad (7.11)$$

mit $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Und

$$\hat{H}_c u_{n,l,m_l,m_s} = E_{n,l} u_{n,l,m_l,m_s} \quad (7.12)$$

Pauli-Prinzip: $\psi_c(q_1, \dots, q_N)$ vollständig antisymmetrisch \Rightarrow Schreibe ψ_c als $N \times N$ -Determinante:

$$\psi_c(q_1, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_\alpha(q_1) & u_\beta(q_1) & \dots & u_\nu(q_1) \\ u_\alpha(q_2) & u_\beta(q_2) & \dots & u_\nu(q_2) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ u_\alpha(q_N) & u_\beta(q_N) & \dots & u_\nu(q_N) \end{vmatrix} \quad (7.13)$$

Die Determinante nennt man auch Slater-Determinante.

Beachte:

- ψ_c antisymmetrisch
- Spin-Orbital (7.11) hat Parität $(-1)^l \Rightarrow \psi_c$ hat Parität $(-1)^{l_1}(-1)^{l_2} \dots (-1)^{l_N} = (-1)^{\sum_i l_i}$

Man sieht leicht, dass $[\hat{H}_c, \hat{L}] = [\hat{H}_c, \hat{S}] = 0$ wobei, $\hat{L} = \sum_i l_i$ (Gesamtdrehimpuls der Ne^-) und $\hat{S} = \sum_i \hat{s}_i$ (Gesamtspin der Ne^-) ist.

\Rightarrow Es existieren simultane Eigenfunktionen zu $\hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z$ mit Eigenwerten $L(L+1)\hbar^2, M_L\hbar, S(S+1)\hbar^2, M_S\hbar$.

Aber: Slater-Determinante basiert auf Einelektron-Orbitalen in der n, l, m_l, m_s -Darstellung \Rightarrow (7.13) ist im Allgemeinen kein Eigenzustand von \hat{L}^2 und \hat{S}^2 .

7.3 Elektronenzustände in Zentralfeld-Konfiguration und Schalen

Bis hierher: Eigenwerte und Eigenfunktionen von \hat{H}_C

\leftrightarrow bestimme $E_{n,l}$ der individuelle Spin-Orbitale

\leftrightarrow löse Radialgleichung (7.10) für $V(r)$, welche die Bedingungen (7.4) erfüllt

Bemerkungen:

- Reihenfolge der $E_{n,l}$ nur schwach abhängig von genauer Form von $V(r)$
- Abschirmung wächst für wachsendes n und $l \Rightarrow E_{n,l}$ wächst mit n für festes l bzw. l für festes n
- Für Grundzustand und niedrige angeregte Zustände ist die Reihenfolge der $E_{n,l}$ fast für alle Atome identisch
- Gesamtenergie gegeben durch Verteilung der Elektronen bezüglich Quantenzahlen n und $l \Rightarrow$ Elektronenkonfiguration

- Elektronen mit n und l besetzen gleiche „Unterschalen“ (max. $2(2l + 1)$). Eine Unterschale mit $2(2l + 1)$ Elektronen nennt man geschlossen.
- Elektronen mit gleichem n besetzen die gleiche „Schale“ (max. $2n^2$). Eine Schale mit $2n^2$ Elektronen nennt man „geschlossen“

7.4 Selbstkonsistente Berechnung des Zentralfeldes

Bis hierher: Qualitative Aussagen über $E_{n,l}$ aufgrund asymptotischen Verhaltens von $V(r)$. Quantitative Berechnung von $E_{n,l} \rightarrow$ löse Radialgleichung (7.10).

Problem: $V(r)$ ist unbekannt und muss gleichzeitig bestimmt werden.

Idee(Hartree): Verwende iterative Methode um selbstkonsistente Lösung ($R_{n,l}$ und $V(r)$) zu finden.

Skizziere Hartree-Methode:

1. Möglichst vernünftiger Ansatz von $V(r)$ des k -ten Elektrons.
2. Bestimme numerisch Einelektronen-Orbital $u_{n_k, l_k, m_{l_k}, m_{s_k}}$ aus Radialgleichung (7.10)
3. Wiederhole (1) und (2) für alle N Elektronen
4. Bestimme verbessertes $V(r)$ durch:

$$V(r_k) = -\frac{Z}{r_k} + \sum_{i \neq k}^N \int u_i^*(r_i) \frac{1}{r_{ik}} u_i(r_i) d^3 \vec{r} \quad (7.14)$$

5. Wiederhole (1) bis (4) bis Ergebnisse zu selbstkonsistenten Werten von $V(r)$ und u_k konvergieren
6. Konstruiere Wellenfunktion des gesamten Atoms:

$$\psi_H(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{k=1}^N u_{n_k, l_k, m_{l_k}, m_{s_k}}(\vec{r}_k) \quad (7.15)$$

Bemerkungen:

- ψ_H ist nicht antisymmetrisch \Rightarrow Berücksichtigung des Pauli-Prinzips insofern als dass alle Quantenzahlen für alle Elektronen unterschiedlich sind
- Vernünftiger Ausgangspunkt für $V(r)$ z.B. durch Thomas-Fermi-Modell \Rightarrow beschreibe die Elektronen als Fermigas im Grundzustand und berechne $V(r)$ aus resultierender Elektronendichte

- Genaueres Verfahren (Hartree-Fock-Methode): Benutze Slater-Determinante bei Lösung des Radialproblems \Rightarrow besser weil Berücksichtigung elektrostatischer Austauschsterme, aber deutlich aufwändiger
- ψ_H bzw. ψ_{HF} minimieren Gesamtenergie auf typischerweise besser als 1%, liefern aber weniger genaue Ergebnisse ($\sim 10\%$) bei Berechnung von Radialmatrixelementen
- Methoden lassen sich deutlich verfeinern

Kapitel 8

Grundlegende Konzepte der Kernphysik

Beginn der Kernphysik \leftrightarrow Entdeckung der Radioaktivität (α -, β -, γ -Strahlung) Ende des 19. Jahrhunderts.

Rutherford 1911 (Streuung von α -Teilchen):

Gesamte positive Ladung und fast die gesamte Masse des Atoms sind in extrem kleinen Atomkern enthalten.

Nur erklärbar mit weiterer Fundamentalkraft (starke Wechselwirkung), die stärker und kurzreichweitiger als die damals bekannte Gravitation und elektromagnetische Wechselwirkung sein muss.

Stärker: Coulombabstoßung der positiven Ladungen wird im Kern überkompensiert.

Kurzreichweitiger: Effekte treten erst ab weniger als $10^{-14}m$ auf.

8.1 Der Atomkern

Typischer Kernradius $\sim 10^{-14}m$ bis $10^{-15}m$.

$\Rightarrow 10^{-4}$ bis 10^{-5} mal kleiner als Atom, aber mehr als 99% der Masse

\Rightarrow Dichte von Kernmaterie $\sim 10^{14}g/cm^3$ (H_2O $1g/cm^3$) (Volumen von Größe eines Zuckerwürfels wöge $\sim 100Mio.t$)

8.1.1 Kernbausteine

Vor Entdeckung des Neutrons: Proton und Elektron sind die bekannten Elementarteilchen \Rightarrow Zusammensetzung des Kerns aus Protonen und Elektronen?

Beispiel: 4He \Rightarrow Masse ≈ 4 Protonen-Massen, Ladung = $+2e$, Durchmesser $\approx 5fm$.

\Rightarrow^4 He-Kern müsste aus 4 Protonen und 2 Elektronen bestehen, wobei die Elektronen im Kern lokalisiert sind.

\Rightarrow Elektronen-Impuls: $p > \frac{h}{10fm} \approx 100 \frac{MeV}{c}$

\Rightarrow Elektronen-Energie: relativistische Energie-Impuls-Beziehung:

$$E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2 \quad (8.1)$$

wegen $pc \approx 100MeV \gg mc^2 = 0,511MeV$ folgt $E \approx pc \approx 100MeV$.

Aber: Elektronen mit so hohen Energien findet man im Kern nicht (E_{max} für β -Zerfall \approx einige MeV).

Außerdem: Kernspin nicht erklärbar

Beispiel: ^{14}N müsste aus 14 Protonen und 7 Elektronen bestehen, also aus 21 Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen \Rightarrow Kernspin müsste halbzahlig sein, ist aber $1\hbar$.

Lösung durch Entdeckung des Neutrons (Chadwick 1932). \rightarrow Kern besteht aus Protonen und Neutronen (beide Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen). Massen fast identisch, $m_n = 1,008665u$, $m_p = 1,007277u$, wobei u die atomare Masseneinheit ($\frac{1}{12}$ der Masse eines ^{12}C -Atoms) ist.

Gegebener Atomkern wird beschrieben durch: $^A_Z X_N$

N und Z: Zahl der Neutronen und Protonen im Kern. $A = Z + N$ ist die Zahl der Nukleonen (Kernbausteine) und X das Elementsymbol (bestimmt durch Z).

Eigentlich ausreichend zur Beschreibung: $^A X$ (z.B.: ^{235}U , ^{238}U)

Beachte:

- A entspricht grob der relativen Atommasse in u
- Zahl der Protonen ist gleich der Ordnungszahl im Periodensystem der Elemente
- Kern mit gleichem Z und unterschiedlichem N bzw. A \rightarrow Isotope eines Elements (z.B.: $^{16}_8O_8$, $^{17}_8O_9$, $^{18}_8O_{10}$)
- Kerne mit gleichem A (N) \rightarrow Isobare (Isotone)
- Übersichtliche Darstellung aller bekannten Atomkerne (Nuklide) mitsamt einigen wesentlichen Eigenschaften findet man in der so genannten Nuklidkarte

8.2 Eigenschaften des Grundzustandes von Kernen

Wie Atome haben Kerne Eigenschaften, die durch quantisierte Größen beschrieben werden (Ladung, Masse/Ruheenergie, Drehimpuls/Kernspin, Parität, Iso-

spin), sowie solche, die von den Massen-, Ladungs- oder Stromverteilungen abhängen (elektrische und magnetische Momente und Wechselwirkungsquerschnitte für Streuung und Kernreaktionen) und über diese Aufschluss geben.

8.2.1 Ladungsverteilung von Atomkernen

Untersuchung von Größe und Form von Kernen \leftrightarrow Streuung von geladenen Teilchen (Elektronen, α , Protonen) am Kern.

Elektronen-Streuung (nur Coulomb-Wechselwirkung): Sonde für Ladungsverteilung (Hofstadter, Nobelpreis 1961)

Frage: Was passiert mit nuklearer Dichte, wenn Zahl der Nukleonen steigt?

Annahme: Jedes Nukleon wird von allen anderen angezogen

Schlussfolgerung: Dichte sollte mit A ansteigen und mit dem Abstand vom Zentrum des Kerns abnehmen

Experiment: Beides trifft nicht zu

Beachte:

- Kernladungsverteilung ist bemerkenswert konstant, (sowohl radial für gegebenen Kern als auch als Funktion von A)
- Unter der Annahme, dass die Neutronendichte der Ladungsdichte entspricht, gibt letztere auch die Nukleonendichte wieder. Es gilt

$$\text{Nukleonendichte} = \frac{A}{Z} \cdot \text{Ladungsdichte} \quad (8.2)$$

- Die Nukleonendichte ist für alle Kerne nahezu gleich!
- Konstante Nukleonendichte \leftrightarrow Kernkraft ist sehr kurzreichweitig und sättigt
- Kernradius folgt in erster Näherung dem Zusammenhang

$$R = R_0 A^{1/3} \quad (8.3)$$

R_0 : explizit bestimmte Proportionalitätskonstante (für die meisten Anwendungen: $R_0 = 1,2 \cdot 10^{-15} \text{m}$)

Beispiele:

$${}^{27}\text{Al-Kern} \Rightarrow R = 1,2 \cdot 10^{-15} \text{m} \cdot \sqrt[3]{27} = 3,6 \cdot 10^{-15} \text{m}$$

$${}^{216}\text{Rn-Kern} \Rightarrow R = 1,2 \cdot 10^{-15} \text{m} \cdot \sqrt[3]{216} = 7,2 \cdot 10^{-15} \text{m}$$

\Rightarrow Kern mit 8-facher Nukleonenzahl ist (nur) doppelt so groß!

- (8.3) setzt voraus, dass Kerne sphärisch sind, was nicht immer zutrifft \Rightarrow verwende rms-Radius (rms=root mean square) bei deformierten Kernen
- Ladungsverteilung in Atomkernen lässt sich in guter Näherung durch Fermi-Funktion (Woods-Saxon-Verteilung) parametrisieren:

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{1 + \exp\left[\frac{r-R}{a}\right]} \quad (8.4)$$

R : Halbdichterradius ($\rho(R) = \rho_0/2$), experimentell $R = 1,07 \text{ fm} \cdot A^{1/3}$
 a : beschreibt „Oberflächenverschmierung“, experimentell: $a = 0,55 \text{ fm}$ unabhängig von A

- Definiere als Hautdicke d den Bereich, in dem $\frac{\rho(r)}{\rho_0}$ von 0,9 auf 0,1 abfällt $\Rightarrow d = 2,4 \text{ fm}$

8.2.2 Masse von Atomkernen

Beachte: Kernmasse \neq Summe der Konstituenten

Beispiel: Deuterium (${}^2_1\text{H}_1$ -)Kern (auch Deuteron) setzt sich zusammen aus p und n . Summe der Massen:

$$m_n + m_p = 1,008665u + 1,007276u = 2,0159414u$$

Deuteronenmasse:

$$m_D = 2,013553u \neq m_n + m_p$$

Differenz:

$$m_n + m_p - m_D = 0,002388u = 2,224 \text{ MeV}$$

($1u = 931,5 \text{ MeV}$) \Rightarrow Massendefekt \leftrightarrow Bindungsenergie

Für Kern der Masse m und nuklearen Bindungsenergie B gilt

$$m = Zm_p + Nm_n - \frac{B}{c^2} \quad (8.5)$$

Für atomare Masse M gilt

$$M = Zm_p + Nm_n + Zm_0 - \frac{B}{c^2} \quad (8.6)$$

bzw.

$$\begin{aligned} B &= (Zm_p + Nm_n + Zm_0 - M)c^2 \\ &= [ZM({}^1\text{H}) + Nm_n - M({}^A_Z\text{X}_N)] c^2 \end{aligned} \quad (8.7)$$

Definiere Massendefekt als

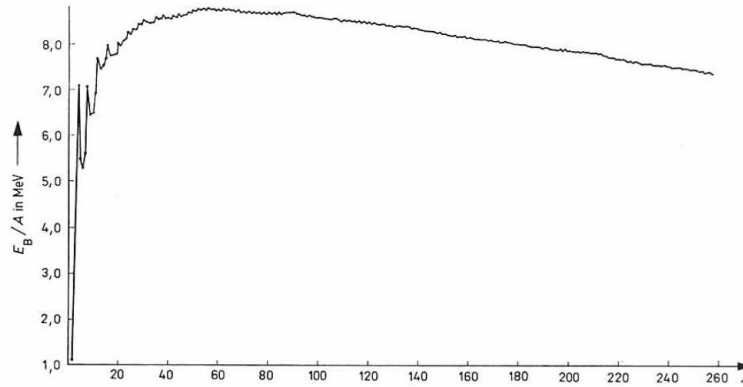
$$\Delta = [M(X) - A] c^2 \quad (8.8)$$

$\Rightarrow \Delta$ ist oft negativ

$$\Rightarrow M(A_x) = A + \Delta(A_x) \quad (8.9)$$

Betrachte Bindungsenergie pro Nukleon:

Bindungsenergie pro Nukleon für stabile Atomkerne

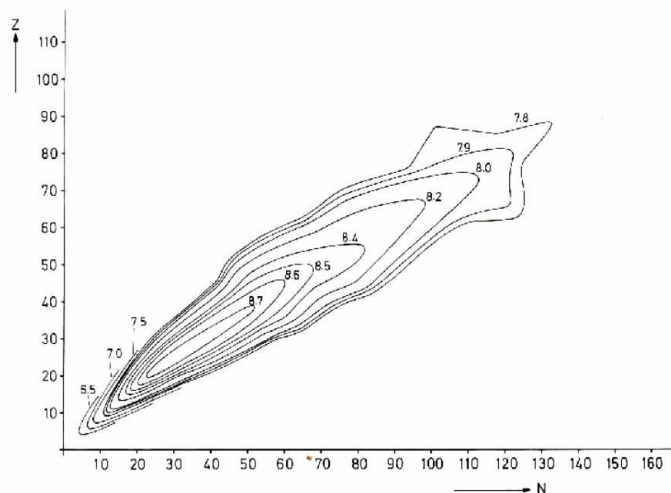


Bemerkungen:

- $\frac{B}{A} \approx \text{const.}$ ($7,5 \text{ MeV} \leq \frac{B}{A} \leq 8,8 \text{ MeV}$) für $A \geq 12$
 \Rightarrow Kernkräfte kurzreichweitig und sättigen
 \Rightarrow Reichweite der Kernkräfte $\approx 1,5 \text{ fm}$ da $\frac{B}{A}$ schon für α -Teilchen fast gesättigt ($\approx 7 \text{ MeV}$)
- $\frac{B}{A}$ maximal im Bereich von Nickel und Eisen \Rightarrow Energiegewinnung durch Fusion leichter bzw. Spaltung schwerer Kerne ($\approx 1 \text{ MeV}$ pro Nukleon)
- Oszillationen für kleine A mit Maximum für α -Teilchen \Rightarrow Existenz des α -Zerfalls
- ${}^8\text{Be}$, ${}^{12}\text{C}$ und ${}^{16}\text{O}$ besonders stark gebunden \Rightarrow α -Cluster-Modell der Atomkerne
- Größeres $\frac{B}{A}$ für Kerne mit gerader Protonen- und/oder Neutronenzahl \Rightarrow sehr kurzreichweitige Wechselwirkung zwischen Nukleonen (sogenannte Paarungswechselwirkung) \Rightarrow vgl. Bildung von Cooper-Paaren in Supraleitung

Trage $-\frac{B}{A}$ als dritte Koordinate in Nuklidkarte auf \Rightarrow Energietal der Atomkerne

Bindungsenergie pro Nukleon als Funktion von N & Z



\Rightarrow stabile Kerne liegen in der Talsohle

\Rightarrow Kerne an Seitenwänden des Tals können zerfallen:

$$\beta^- \text{-Zerfall: } n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e \quad (8.10)$$

$$\beta^+ \text{-Zerfall: } p \rightarrow n + e^+ + \nu_e \quad (8.11)$$

$$\text{Elektroneneinfang: } p + e^- \rightarrow n + \nu_e \quad (8.12)$$

Übergänge sind möglich, wenn Q -Wert der Reaktion positiv ist:

$$Q(\beta^-) = [m(Z, N) - m(Z + 1, N - 1)] c^2 \quad (8.13)$$

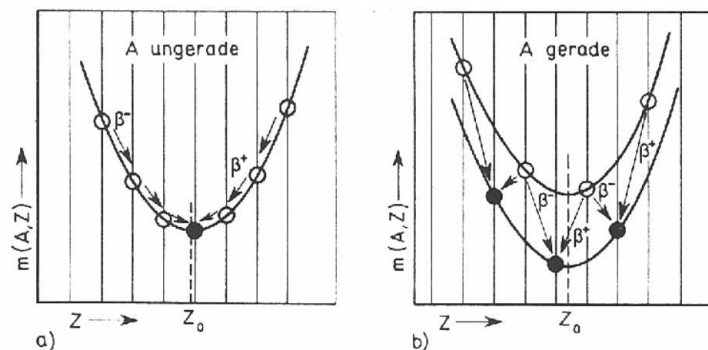
$$Q(\beta^+) = [m(Z, N) - m(Z - 1, N + 1) - 2m_0] c^2 \quad (8.14)$$

$$Q(\text{EE}) = [m(Z, N) - m(Z - 1, N + 1)] c^2 \quad (8.15)$$

(EE = Elektroneneinfang)

Übersichtliche Darstellung der β -Zerfalls-Möglichkeiten \rightarrow Schnitt durch Energiefläche

Vergleich von Kernmassen mit gleicher Nukleonenzahl



Bemerkungen:

- Verschiedene Energieflächen, je nachdem, ob Z und N gerade (g) oder ungerade (u) \Rightarrow man spricht von gg-, gu-, ug- und uu-Kernen
- Energieflächen von ug- und gu-Kernen fallen annähernd zusammen und liegen zwischen gg- und uu-Flächen
- Schnitte sind parabelförmig, Weite der Parabel nimmt mit A zu
- A ungerade \Rightarrow jeweils nur ein Kern stabil
- A gerade \Rightarrow bis zu 3 Kerne stabil
- $A \leq 14 \Rightarrow$ es existieren uu-Kerne (${}^2\text{H}$, ${}^6\text{Li}$, ${}^{10}\text{B}$ und ${}^{14}\text{N}$) (Parabel so schmal, dass Massen kleiner als die benachbarter gg-Isobare)

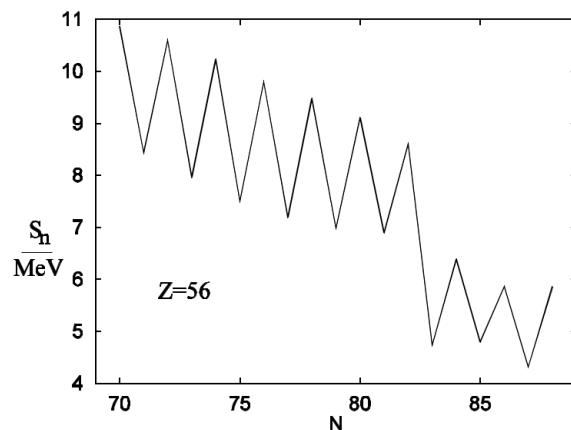
Separationsenergien für p und n :

$$S_p(Z, N) = -Q_p(Z, N) = [m(Z-1, N) + m_p - m(Z, N)] c^2 \quad (8.16)$$

$$S_n(Z, N) = -Q_n(Z, N) = [m(Z, N-1) + m_n - m(Z, N)] c^2 \quad (8.17)$$

Experimentelle Werte von S_p und S_n weisen auf Paarungsenergie und Schalen-effekte hin:

Separationsenergien des Neutrons für Ba-Isotope



- Paarungseffekt: Separationsenergie für gepaarte p oder n deutlich größer als für ungepaarte Nukleonen
- Schaleneffekt: Es treten Sprünge von S_p bzw. S_n bei sogenannten magischen Zahlen auf (p : 2, 8, 20, 28, 82, 114; n : 2, 8, 20, 28, 82, 126) \Rightarrow Schalenstruktur der Atomkerne

Separationsenergie für α -Zerfall:

$$S_\alpha(Z, N) = -Q_\alpha(Z, N) = [m(Z-2, N-2) + m_\alpha - m(Z, N)] c^2 \quad (8.18)$$

\Rightarrow Kerne mit positivem Q_α können durch α -Zerfall Energie erniedrigen. Aber: Merkbare α -Aktivität (Halbwertszeit $< 10^{12}$ Jahre) erst für $Q_\alpha \gtrsim 4 \text{ MeV}$.

8.2.3 Semi-empirische Massenformel

Bis jetzt: $\frac{B}{A}$ experimentell bestimmt

C.F. von Weizsäcker (1935): Die Terme tragen zu $\frac{B}{A}$ bei:
Volumen-, Oberflächen-, und Coulombterm

$$B = B_v - B_s - B_c \quad (8.19)$$

(1) $\frac{B}{A} \approx \text{const.}$ für $A \geq 12 \Rightarrow B \sim A$

(2) $R = R_0 A^{1/3}$ (vgl. (8.3))

(1) und (2) \Rightarrow

$$B_v = a_v V \quad (8.20)$$

(3) Nukleonen an Kernoberfläche haben weniger Bindungspartner \Rightarrow Oberflächenbeitrag negativ

(3) Oberfläche $\sim R^2 \sim A^{2/3}$

(3) und (4) \Rightarrow

$$B_s = a_s \cdot A^{2/3} \quad (8.21)$$

(5) Positive Protonen stoßen einander ab \Rightarrow Coulomb-Beitrag negativ. Setze Kern aus ∞ -weit voneinander entfernten Protonen zusammen \Rightarrow

$$B_c = \frac{3}{5} \cdot Z(Z-1) \frac{e^2}{R} \quad (8.22)$$

bzw.

$$B_c \approx a_c Z^2 A^{-1/3}$$

Bestimme a_v und a_s aus Experimenten und berechne

$$a_v = 15,5 \text{ MeV}, \quad a_s = 16,8 \text{ MeV}, \quad a_c = 0,72 \text{ MeV} \quad (8.23)$$

Gleichung (8.19) kann noch durch zwei Terme verfeinert werden

- Asymmetrieenergie: Fermionische Eigenschaften von p und n
 \Rightarrow Modulo Coulombenergie dürfen N und Z nicht stark voneinander abweichen
 \Rightarrow Energiebeitrag:

$$-a_a(Z-N)^2 A^{-1} \quad (8.24)$$

Aus Experimenten: $a_a = 23,2 \text{ MeV}$

- Paarungsterm: Nukleonenpaare sind stärker gebunden als einzelne Nukleonen, wobei die Paarungsenergie mit steigender Massenzahl abnimmt
 \Rightarrow Beziehe Bindungsenergie auf ug- bzw. gu-Kerne \Rightarrow

$$B_p = \begin{cases} a_p \frac{1}{\sqrt{A}} & \text{für gg-Kerne} \\ 0 & \text{für } A \text{ ungerade} \\ -a_p \frac{1}{\sqrt{A}} & \text{für uu-Kerne} \end{cases} \quad (8.25)$$

wobei

$$a_p = 11,3 \text{ MeV} \quad (8.26)$$

Berücksichtigung aller 5 Terme führt auf die Weizsäckerformel:

$$B(Z, N) = a_v A - a_s A^{2/3} - a_c Z^2 A^{-1/3} - a_a (Z-N)^2 A^{-1} (\pm a_p A^{-1/2}) \quad (8.27)$$

8.3 Spin und Momente von Atomkernen im Grundzustand

8.3.1 Kernspin

Experimentelle Erkenntnisse:

- Protonen und Neutronen sind Fermionen mit Spin $\frac{1}{2}$ (wie Elektronen).
Aber: Kernspin ist ungleich der Summe der Protonen- und Neutronenspins, da sowohl die Protonen als auch die Neutronen zusätzlich noch einen Bahndrehimpuls besitzen können
- Im Grundzustand sind die Kernspins
 - (a) aller gg-Kerne gleich 0
 - (b) aller ug- und gu-Kerne halbzahlige Vielfache von \hbar
 - (c) aller uu-Kerne ganzzahlige Vielfache von \hbar

Bemerkungen:

- Gesamtspin des Kerns entsteht durch starken Kopplungsmechanismus
- (a)-(c) beschreiben nur Kerne im Grundzustand, ein angeregter gg-Kern kann beispielsweise auch einen Spin ungleich 0 haben.

8.3.2 Magnetisches Dipolmoment

Erinnerung: Magnetisches Dipolmoment des Elektrons:

$$\hat{\mu}_e = -\frac{\mu_B}{\hbar}(\hat{l} + g_{e,s}\hat{S}) \quad (8.28)$$

mit dem Bohr'schen Magneton

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} \quad (8.29)$$

und dem g-Faktor für den Spin der Elektronen $g_{e,s} = 2$.

Beachte: $g_{e,s} = 2$ folgt für Elektronen (Spin-1/2-Teilchen) aus der Dirac-Gleichung, falls das Elektron eine Punktladung ist.

Annahme: Das Proton (ebenfalls Spin 1/2) entspricht einer Punktladung \Rightarrow magnetisches Dipolmoment des Protons:

$$\hat{\mu}_p = \frac{\mu_K}{\hbar}(\hat{l} + g_{p,s}\hat{S}) \quad (8.30)$$

mit dem Kernmagneton

$$\mu_K = \frac{e\hbar}{2m_p c} \quad (8.31)$$

und $g_{p,s} = 2$.

Aber: Stern fand experimentell

$$g_{p,s} = 5,6 \quad (8.32)$$

Weiterhin würde man für das Neutron unter der Annahme eines neutralen Punktteilchens erwarten, dass $g_{n,l} = 0$ und $g_{n,s} = 0$ sind. Aber experimentell findet man

$$\hat{\mu}_n = \frac{e\hbar}{2m_n c} g_{n,s} \frac{\hat{S}}{\hbar} \quad (8.33)$$

mit

$$g_{n,s} = -3,82 \quad (8.34)$$

Insgesamt: Magnetische Momente von Protonen und Neutronen \Leftrightarrow Protonen und Neutronen sind keine Punktteilchen, sondern haben eine innere Struktur und eine inhomogene Ladungsverteilung.

Magnetisches Moment von Atomkernen \Rightarrow Betrachte Deuteron ($p + n$):

Aus den Gleichungen (8.30) bis (8.34) folgt unter der Annahme von $l = 0$, $\mu_p = 2,79\mu_K$ und $\mu_n = -1,91\mu_K$ und somit $\mu_p + \mu_n = 0,88\mu_K$.

Experimentell findet man aber $0,86\mu_K \Rightarrow$ die Annahme von $l = 0$ trifft nicht zu. Der Deuteron-Grundzustand ist kein reiner S-Zustand \Rightarrow Bahnbewegung der Nukleonen im Kern muss zur Berechnung des magnetischen Momentes von Kernen berücksichtigt werden. Folglich stellt also die Messung von magnetischen Momenten einen guten Test für die Kernmodelle dar.

8.3.3 Das elektrische Quadrupolmoment

Betrachte Energie eines Kerns mit Ladungsdichteverteilung $\varrho(\vec{r})$ im elektrischen Potential $V(\vec{r})$ (welches z.B. durch die Elektronenhülle erzeugt wird)

$$E_{pot} = \int V(\vec{r})\varrho(\vec{r})d^3r \quad (8.35)$$

Entwickle $V(\vec{r})$ um $r = 0$ (Zentrum des Kerns)

$$V(\vec{r}) = V_0 + \vec{r}(\vec{\nabla}V(\vec{r})|_{r=0}) + \dots \quad (8.36)$$

- Erster Term in Gleichung (8.36):

$$V_0 \int \varrho(\vec{r})d^3r = qV_0 \quad (8.37)$$

\Rightarrow die potentielle Energie der Gesamtladung q im Potential am Kernort V_0

- Zweiter Term: drei Glieder der Form

$$\frac{\partial V}{\partial z} \int z \varrho d^3 r \quad (8.38)$$

⇒ die potentielle Energie des Dipolmoments $\vec{D} = \int \vec{r} \varrho d^3 r$ im Feld $\vec{E} = -\text{grad}\vec{V}$.

Quantenmechanisch:

$$\varrho(\vec{r}) = q\psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}) \quad (8.39)$$

Beachte: $\psi(\vec{r})$ hat definierte Parität ⇒

$$\varrho(-\vec{r}) = \varrho(\vec{r}) \quad (8.40)$$

⇒ Kerne haben keine statischen Dipolmomente.

- Dritter Term: Glieder mit $\frac{\partial^2 V}{\partial z^2} = -\frac{\partial E}{\partial z}$, also abhängig vom Feldgradienten.

Vereinfachung: Nimm Zylindersymmetrie in z-Richtung an und setze $E_z(r=0) = 0$ (es zählt hier nur der Feldgradient). Wir schreiben für

$$\left(\frac{\partial E_z}{\partial z}\right)_{r=0} = C \quad (8.41)$$

und daher

$$E_z = Cz \quad (8.42)$$

Feld wird erzeugt von außen liegenden Quellen: ⇒

$$\text{div}(\vec{E}) = \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + C = 0 \quad (8.43)$$

Zylindersymmetrie liefert

$$E_x = -\frac{C}{2}x \quad \text{und} \quad E_y = -\frac{C}{2}y \quad (8.44)$$

und damit folgt schließlich

$$V(\vec{r}) = -\frac{C}{4}(2z^2 - x^2 - y^2) = -\frac{C}{4}(3z^2 - r^2) \quad (8.45)$$

Einsetzen in Gleichung (8.35) liefert

$$E_{pot} = -\frac{1}{4} \left(\frac{\partial E_z}{\partial z}\right) eQ_z \quad (8.46)$$

mit dem elektrischen Quadrupolmoment bezüglich der z-Achse

$$Q_z = \frac{1}{e} \int (3z^2 - r^2) \varrho(\vec{r}) d^3 r \quad (8.47)$$

Bemerkungen:

- Die (bis jetzt klassisch) definierte Größe Q_z hängt ab von der Orientierung der Deformationsachse zur z-Achse
- Deformationsrichtung hängt aber mit der Drehimpulsrichtung zusammen. \Rightarrow Nur solche Orientierungen sind möglich, für die die z-Komponente von I quantenmechanisch erlaubte Werte annimmt. \Rightarrow Größter Wert von Q_z für $m_I = I \Rightarrow$ Definiere als Quadrupolmoment von Q den Erwartungswert des Operators

$$\hat{Q} = \frac{1}{e}(3z^2 - r^2) = \frac{1}{e}r^2(\cos\theta - 1) \quad (8.48)$$

für einen Kern, dessen Spin in z-Richtung zeigt

$$Q = \langle \psi | \hat{Q} | \psi \rangle_{m_I=I} = \frac{1}{e} \int (3z^2 - r^2) \varrho_{m_I=I}(\vec{r}) d^3 r \quad (8.49)$$

- Wechselwirkung von Q mit Atomhülle \Rightarrow Hyperfeinstruktureffekte. Diese kann man zur Bestimmung von Q benutzen.

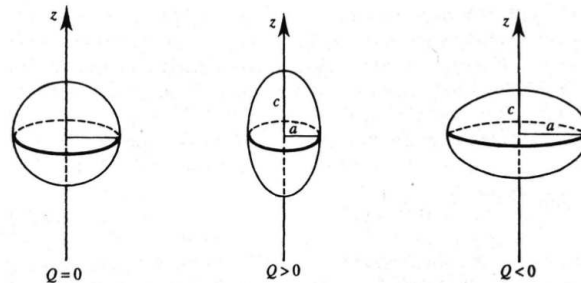
Zur Veranschaulichung: berechne mit Gleichung (8.47) Q für ein homogen geladenes Rotationsellipsoid mit Ladung Ze und Halbachsen a und b (z-Richtung):

$$Q = \frac{2}{5}Z(a^2 - b^2) \quad (8.50)$$

Daraus folgt nun

- $Q = 0 \rightarrow$ sphärischer Kern ($b = a$)
- $Q > 0 \rightarrow$ prolater Kern ($b > a$)
- $Q < 0 \rightarrow$ oblater Kern ($b < a$)

Beziehung zwischen Deformation & Quadrupolmoment



Yang & Hamilton, Modern Atomic and Nuclear Physics, World Scientific (2010)

Einige experimentelle und theoretische Ergebnisse:

- Quadrupolmoment des Deuterons:

$$Q_d = 0,00282b = 0,282 \cdot 10^{-28}m^2 = 0,282fm^2$$

wobei b für die Einheit Barn ($1b = 10^{-28}m^2$) steht.

Der Deuteron-Zustand ist kein $S(L = 0)$ -Zustand. Rechnungen zeigen einen Anteil von 96% mit $L = 0$, also 3S_1 und einen Anteil von 4% mit $L = 2$, also 3D_1 . Diese Mischung ergibt auch das korrekte magnetische Dipolmoment.

- Experimentelle Werte von $Q \Rightarrow$ wichtige Tests für Kernmodelle
- Höhere Glieder der Multipolentwicklung \leftrightarrow höhere statische elektrische und magnetische Momente von Kernen. Klassifizierung nach Multipolordnung $L(2^L\text{-pol})$
- Alle ungeraden elektrischen und alle geraden magnetischen Momente von Kernen verschwinden
- Für Zustand mit Gesamtdrehimpuls I verschwindet der Erwartungswert aller Multipolelemente der Ordnung $L > 2I$ (folgt aus dem Wigner-Eckert-Theorem).
Bsp.: Für Kerne mit $I = 0$ bzw. $I = \frac{1}{2}$ ist $Q = 0$.
- Höhere Multipolelemente \leftrightarrow „exotische“ Kerndeformationen.
Bsp.: Hexadekapolmoment von ${}^{234}\text{U}$ und ${}^{180}\text{Hf}$.

Kapitel 9

Kernmodelle

Bis jetzt wissen wir qualitativ: Kernkräfte sind kurzreichweitig ($r < 10^{-14}\text{m}$), sehr stark (~ 100 mal stärker als Coulomb-Wechselwirkung innerhalb des Kerns) und sättigen.

Außerdem: Kerne haben endliche Größe \Rightarrow starke repulsive Kraft zwischen Nukleonen für sehr kleine Abstände.

Insgesamt scheint Kernmaterie sich wie eine Flüssigkeit zu verhalten (vgl. Weizsäcker-Formel). Aber wir werden sehen, dass der Kern näherungsweise als System unabhängiger (d.h. nicht wechselwirkender) Teilchen beschrieben werden kann, die sich im mittleren Kernpotential bewegen, das durch die anderen Nukleonen erzeugt wird. Der Einfluss der paarweisen Wechselwirkung führt zu zusätzlichen Korrekturen.

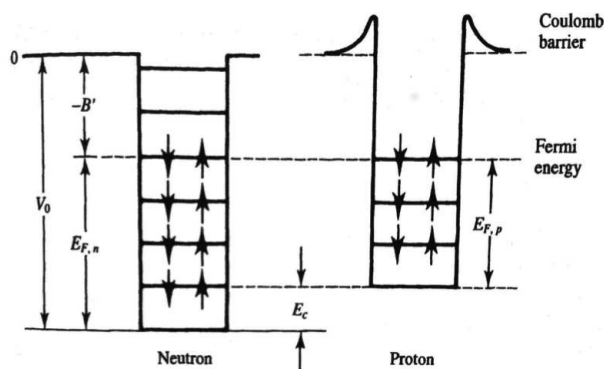
Beachte: Ansatz analog wie zur Beschreibung von Mehrelektronen-Atomen (vgl. Kapitel 7).

9.1 Fermigasmodell

Betrachte Nukleonen als wechselwirkungsfreies Fermigas in einem dreidimensionalen Kastenpotential \Rightarrow diskrete Energieniveaus.

Kern im Grundzustand \Rightarrow Nukleonen besetzen unter Beachtung des Pauli-Prinzips die niedrigsten verfügbaren Energiezustände.

Kastenpotential für Neutronen und Protonen



Yang & Hamilton, Modern Atomic and Nuclear Physics, World Scientific (2010)

Energieniveaus in würfelförmigen Potential mit Volumen d^3 :

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{h^2}{8md^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad (9.1)$$

mit $n_i = 1, 2, 3, \dots$ und m als der Masse des Teilchens. Daraus folgt, dass die Zahl der Zustände bis zur Fermi-Energie E_F gleich der Zahl der Kombinationen (n_1, n_2, n_3) ist, für die gilt

$$(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) < \frac{8mE_F d^2}{h^2} \quad (9.2)$$

Was aber nichts anderes als ein Achtel (da $n_i > 0$) des Volumens einer Kugel mit Radius

$$R_F = \sqrt{\frac{8mE_F d^2}{h^2}} \quad (9.3)$$

ist. \Rightarrow Zahl der Zustände:

$$N = \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} R_F^3 = \frac{\pi}{6} \left(\frac{8mE_F d^2}{h^2} \right)^{3/2} \quad (9.4)$$

Betrachte zunächst Neutronen (2 pro Energiezustand)

$$\Rightarrow N = \frac{\pi}{3} \left(\frac{8mE_{F,n} d^2}{h^2} \right)^{3/2} \quad (9.5)$$

Für das Kernvolumen gilt:

$$d^3 = \frac{4\pi}{3} R_0^3 A \quad (9.6)$$

Einsetzen in (9.5) und Auflösen nach $E_{F,n}$ liefert

$$E_{F,n} = \frac{\hbar^2}{2m_n R_0^2} \left(\frac{9\pi N}{4A} \right)^{2/3} \quad (9.7)$$

Analog für die Fermi-Energie der Protonen

$$E_{F,p} = \frac{\hbar^2}{2m_p R_0^2} \left(\frac{9\pi Z}{4A} \right)^{2/3} \quad (9.8)$$

Beachte: $E_{F,n}$ ($E_{F,p}$) ist die maximale kinetische Energie der Neutronen (Protonen) für einen Kern im Grundzustand. Entsprechend erhalten wir für den maximalen Neutronen- bzw. Protonen-Impuls

$$P_{F,n} = \frac{\hbar}{R_0} \left(\frac{9\pi N}{4A} \right)^{1/3} \quad \text{bzw.} \quad P_{F,p} = \frac{\hbar}{R_0} \left(\frac{9\pi Z}{4A} \right)^{1/3} \quad (9.9)$$

mit $R_0 = 1,2 \text{ fm}$ finden wir für symmetrische, als ungeladen angenommene Kernmaterie ($Z = N$)

$$E_{F,n} = E_{F,p} = \frac{\hbar^2}{2m R_0^2} \left(\frac{9\pi}{8} \right)^{2/3} \approx 30 \text{ MeV} \quad (9.10)$$

Zählt man noch die mittlere Separationsenergie pro Nukleon von 8 MeV hinzu, muss das Kernpotential also ca. 40 MeV tief sein.

Mit Hilfe der mittleren kinetischen Energie der Nukleonen

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^{P_F} \frac{p^2}{2m} 4\pi p^2 dp}{\int_0^{P_F} 4\pi p^2 dp} = \frac{3}{5} \left(\frac{P_F^2}{2m} \right) \quad (9.11)$$

finden wir außerdem die gesamte kinetische Energie der Nukleonen

$$\begin{aligned} \langle E(Z, N) \rangle &= N \langle E_N \rangle + Z \langle E_Z \rangle \\ &= \frac{3}{10m} (N P_{F,n}^2 + Z P_{F,p}^2) \\ &= \frac{3}{10m} \frac{\hbar^2}{R_0^2} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \left(\frac{N^{5/3} + Z^{5/3}}{A^{2/3}} \right) \end{aligned} \quad (9.12)$$

$\Rightarrow \langle E(Z, N) \rangle$ ist minimal für $Z = N$.

Weiterhin finden wir für $Z - N = \delta$ mit $\frac{\delta}{A} \ll 1$ mittels Entwicklung von (9.12)

$$\langle E(Z, N) \rangle \approx \frac{3}{10m} \frac{\hbar^2}{R_0^2} \left(\frac{9\pi}{8} \right)^{2/3} \left(A + \frac{5}{9} \left(\frac{Z - N}{A} \right)^2 \right) \quad (9.13)$$

Bemerkungen:

- Erster Term $\propto A$ trägt zur Volumenenergie bei
- Zweiter Term kann geschrieben werden als

$$a_a \frac{(Z - N)^2}{A} \quad (9.14)$$

mit

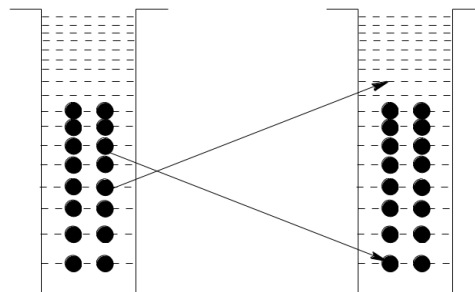
$$a_a = \frac{1}{6} \left(\frac{9\pi}{8} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{mR_0^2} \quad (9.15)$$

\Rightarrow Asymmetrieenergie (vgl. Abschnitt 8.2.3 und Gl. (8.24))

- Bist jetzt nicht beachtet: Coulomb-Abstoßung zwischen Protonen \Rightarrow Protonen-Bindungsenergie wird verringert und außerhalb des Potentialtopfs gibt es eine Coulomb-Barriere
- Für stabilen Kern muss $E_{F_n} \approx E_{F_p}$ sein (sonst Verringerung der Gesamtenergie durch β -Zerfall)
- Aus den letzten zwei obigen Punkten folgt: Neutronenüberschuss in stabilen Kernen
- Begründung des unabhängigen Teilchenmodells:

Inelastischer Stoß zweier gebundener Nukleonen kann immer nur ein Nukleon über Fermikante anheben, während der Stoßpartner Energie verlieren müsste. Unterhalb der Fermikante gibt es aber keine freien Energiezustände \Rightarrow Pauli-Prinzip unterdrückt inelastische Stöße

Unterdrückung inelastischer Stöße durch Pauli-Prinzip



inelastischer Stoß

- Elastische Stöße sind erlaubt, ändern aber wegen der Ununterscheidbarkeit der Teilchen nicht den Gesamtzustand

9.2 Schalenmodell

Exakter Mehrteilchen-Hamiltonoperator für Kern

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^A T_i + \sum_{i,j=1, i < j}^A V_{ij} \quad (9.16)$$

wobei $T_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_i^2$ und V_{ij} das Nukleon-Nukleon-Potential ist.

Behandlung analog zur Zentralfeld-Näherung bei Mehrelektronen-Atomen (vgl. Kapitel 7)

$$\Rightarrow \hat{H} = \hat{H}_0 + V_R \quad (9.17)$$

mit

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^A (T_i + V_i) = \sum_i \hat{h}_i \quad (9.18)$$

mit $h_i = T_i + V_i$, wobei V_i das mittlere Potential auf das Nukleon i , welches durch andere Nukleonen und

$$V_R = \sum_{i < j} V_{ij} - \sum_i V_i \quad (9.19)$$

gegeben ist.

Beachte:

- Aufspaltung (9.17) nur sinnvoll, wenn Energieverhältnisse im Wesentlichen durch \hat{H}_0 bestimmt werden und V_R vergleichsweise klein ist.
- Empirische Rechtfertigung: Mittels Schalenmodell-Hamiltonoperator \hat{H}_0 lassen sich zwanglos viele Kerneigenschaften erklären (insbesondere die beobachteten magischen Zahlen)
- Magische Zahlen: Analog zum Sprung der Ionisierungsenergie bei Atomen springt die Separationsenergie bei Kernen, wenn ein Zustand, der zum nächst höheren eine besonders hohe Energiedifferenz hat, voll besetzt wird.

Realistische Form für mittleres Kernpotential:

$$V(R) = -\frac{V_0}{1 + \exp\left[\frac{r-R}{a}\right]} \quad (9.20)$$

- ⇒ Bestimmung der Energieniveaus ↔ löse Einteilchen-Schrödingergleichung
- ⇒ Besetze Energieniveaus gemäß Pauli-Prinzip

Problem: Es ergeben sich nicht die richtigen Schalenabschlüsse bei allen magischen Nukleonenzahlen

Lösung: Goeppert-Mayer sowie Jansen, Hassel und Suess 1949:
Wechselwirkung zwischen Spin- und Bahndrehimpuls spielt bei Kernpotential eine entscheidende Rolle!

Beachte: Spin-Bahn-Wechselwirkung ist elektromagnetischer Natur und führt zu relativ kleiner Feinstrukturaufspaltung. Mechanismus in Kernen: Austausch von massiven Teilchen (Mesonen) \Rightarrow stark genug, um Termfolge entscheidend zu bestimmen.