

Vorlesung 6

Hyperfeinstruktur der Atomspektren

Zusätzlich zur Feinstruktur gibt es noch einen weiteren Effekt, welcher die Energiespektren beeinflusst. Dabei handelt es sich um die Wechselwirkung zwischen dem magnetischen Moment des Kerns und dem magnetischen Feld, das entweder vom Spin des Elektrons oder vom elektrischen Strom des Elektrons erzeugt wird. In diesem Fall sprechen wir von der Hyperfeinstruktur des Atomspektrums.

Wir werden die Größe dieser Effekte im Falle des Wasserstoffatoms diskutieren. Das Proton hat ein magnetisches Moment $\vec{\mu}_p = g_p \vec{s}_p$. Ein magnetisches Moment erzeugt ein magnetisches Feld

$$\vec{B} \sim \frac{\vec{\mu}_p}{r^3}. \quad (1)$$

Dieses magnetische Feld trägt zur Energie des Elektrons im Wasserstoffatom mittels

$$\Delta E_{HFS} = -\vec{\mu}_e \cdot \vec{B} \sim \frac{\vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_p}{r^3} \quad (2)$$

bei. Um die Größe dieser Energieverschiebung besser einschätzen zu können, schreiben wir

$$\mu_e \sim \frac{e\hbar}{mc}, \quad \mu_p \sim \frac{e\hbar}{m_p c}, \quad (3)$$

wobei m_p die Masse des Protons ist, und erhalten als Abschätzung

$$\Delta E_{HFS} = \frac{\mu_e \mu_p}{a_B^3} \sim \frac{\mu_e \mu_p}{a_B^2} \frac{e^2}{a_B} \sim \frac{m_e}{m_p} \alpha^2 E_{1S}. \quad (4)$$

Die Hyperfeinstruktur der Atomspektren ist $m_e/m_p \sim 10^{-3}$ mal kleiner als die Feinstruktur

$$\Delta E_{HFS} \sim 10^{-3} \Delta E_{FS}. \quad (5)$$

Ganz allgemein können wir sagen, dass das magnetische Moment des Kerns mit dem von den Elektronen erzeugten magnetischen Feld wechselwirkt

$$\Delta E_{HFS} = -\vec{\mu}_K \cdot \vec{B}(\vec{r} = 0). \quad (6)$$

Diese Wechselwirkung ist klein; d.h. wir berechnen das Magnetfeld indem wir über die Elektronenwellenfunktionen mitteln. Dann gilt

$$\vec{B}(\vec{r} = 0) = \gamma \vec{J}, \quad (7)$$

wobei $\vec{J}$ der Drehimpuls der Elektronen ist. D.h.

$$\Delta E_{HFS} = -\gamma \vec{\mu}_K \cdot \vec{J} = -\gamma g_K \vec{I} \cdot \vec{J}, \quad (8)$$

wobei $\vec{I}$ der Drehimpuls des Kerns ist. Jetzt gilt genau die gleiche Diskussion wie im Falle der Spin-Bahn-Wechselwirkung. Der Gesamtdrehimpuls des Atoms $\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}$ ist erhalten und die Energieniveaus werden aufgespalten um den Betrag

$$\Delta E_{HFS} = -\frac{g_K \gamma \hbar^2}{2} (f(f+1) - i(i+1) - j(j+1)). \quad (9)$$

Als Beispiel berechnen wir ΔE_{HFS} für das Wasserstoffatom. Als ersten Schritt brauchen wir dazu das magnetische Feld am Ursprung $\vec{r} = 0$. Ein Elektron, das sich mit Geschwindigkeit $\vec{v}$ bewegt und den Ortsvektor $\vec{r}$ hat, erzeugt das Magnetfeld

$$\vec{B}_L(0) = \frac{e}{cr^3} [\vec{r} \times \vec{v}] = \frac{e}{mcr^3} \vec{L} = -2\frac{\mu_B}{r^3} \vec{L}, \quad (10)$$

wobei $\mu_B = |e|\hbar/(2mc)$ Bohrsche Magneton ist.

Es gibt zusätzlich ein magnetisches Feld, das vom magnetischen Moment des Elektrons erzeugt wird

$$\vec{B}_S(0) = \frac{3\vec{n}(\vec{\mu}_e \cdot \vec{n}) - \vec{\mu}_e}{r^3} = -2\mu_B \frac{3\vec{n}(\vec{s} \cdot \vec{n}) - \vec{s}}{r^3}, \quad (11)$$

wobei $\vec{n} = \vec{r}/r$ bezeichnet. Die Summe von $\vec{B}_L$ und $\vec{B}_s$ ergibt das Gesamtmagnetfeld

$$\vec{B}(0) = \vec{B}_L(0) + \vec{B}_s(0) = \frac{-2\mu_B}{r^3} \left(3\vec{n}(\vec{s} \cdot \vec{n}) - \vec{s} + \vec{L} \right). \quad (12)$$

Wir wollen das Matrixelement dieses Operators berechnen

$$\langle \psi_{njl_s} | \vec{B}(0) | \psi_{njl_s} \rangle. \quad (13)$$

Dieser Operator muss, im Sinne des Vektormodells, proportional zum Operator $\vec{J}$ sein

$$\begin{aligned} \langle \psi_{njl_s} | \vec{L} | \psi_{njl_s} \rangle &= \frac{\langle \psi_{njl_s} | \vec{L} \cdot \vec{J} | \psi_{njl_s} \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle \psi_{njl_s} | \vec{J} | \psi_{njl_s} \rangle, \\ \langle \psi_{njl_s} | \vec{s} | \psi_{njl_s} \rangle &= \frac{\langle \psi_{njl_s} | \vec{s} \cdot \vec{J} | \psi_{njl_s} \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle \psi_{njl_s} | \vec{J} | \psi_{njl_s} \rangle, \\ \langle \psi_{njl_s} | \vec{n}(\vec{s} \cdot \vec{n}) | \psi_{njl_s} \rangle &= \frac{\langle \psi_{njl_s} | (\vec{n} \cdot \vec{J})(\vec{s} \cdot \vec{n}) | \psi_{njl_s} \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle \psi_{njl_s} | \vec{J} | \psi_{njl_s} \rangle. \end{aligned} \quad (14)$$

Jetzt erhalten wir, mithilfe von $(\vec{J} - \vec{S})^2 = \vec{L}^2$ und $(\vec{J} - \vec{L})^2 = \vec{S}^2$,

$$\begin{aligned} \langle \psi_{njl_s} | \vec{J} \cdot \vec{L} | \psi_{njl_s} \rangle &= \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) + l(l+1) - \frac{3}{4} \right), \\ \langle \psi_{njl_s} | \vec{J} \cdot \vec{s} | \psi_{njl_s} \rangle &= \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) + \frac{3}{4} \right), \\ \langle \psi_{njl_s} | (\vec{n} \cdot \vec{J})(\vec{s} \cdot \vec{n}) | \psi_{njl_s} \rangle &= \langle \psi_{njl_s} | (\vec{s} \cdot \vec{n})^2 | \psi_{njl_s} \rangle = \frac{\hbar^2}{4}. \end{aligned} \quad (15)$$

Die letzte Gleichung gilt, weil $\vec{n} \cdot \vec{L} = 0$ ist.

Wir fügen jetzt alles zusammen und erhalten

$$\begin{aligned}\vec{B}(\vec{0}) &= \left\langle \frac{-2\mu_B}{r^3 j(j+1)} \right\rangle \times \\ &\quad \left[\frac{3}{4} - \frac{1}{2} \left(j(j+1) + \frac{3}{4} - l(l+1) \right) + \frac{1}{2} \left(j(j+1) + l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \right] \vec{J} \\ &= \left\langle \frac{-2\mu_B \hbar^2}{r^3} \right\rangle \frac{l(l+1)}{j(j+1)} \vec{J}.\end{aligned}\quad (16)$$

Das Matrixelement $\langle 1/r^3 \rangle$ kennen wir aus Vorlesung 5. Es lautet

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{2\alpha^2}{n^3 a_B^3 l(l+1)(2l+1)}, \quad (17)$$

wobei $a_B = \hbar/(\alpha mc)$ ist. Letztendlich ergibt sich

$$\vec{B}(0) = \frac{-4\mu_B}{n^3 a_B^3} \frac{1}{(2l+1)j(j+1)} \vec{J}. \quad (18)$$

Der effektive Hamiltonoperator für die Hyperfeinstruktur ist

$$\Delta H_{FS} = -\vec{\mu}_P \cdot \vec{B}(0) = -\frac{4\mu_P \mu_B}{n^3 a_B^3} \frac{\vec{s}_P \cdot \vec{J}}{(2l+1)j(j+1)}. \quad (19)$$

Für den Grundzustand des Wasserstoffatoms gilt $l = 0$, $j = 1/2$, $s_p = 1/2$. D.h.

$$\vec{s}_p \cdot \vec{J} = \frac{1}{2} \left(F(F+1) - \frac{3}{2} \right) = \begin{cases} -\frac{3}{2}, & F = 0 \\ \frac{1}{2}, & F = 1 \end{cases} \quad (20)$$

Der Wert des magnetischen Moments des Protons ist $\mu_P = 2.79(m/m_p)\mu_B$, sodass die Aufspaltung des Energieniveaus des Grundzustandes die Folgende ist

$$\Delta E_{HFS}^{\text{grund}} = E_{n=1, l=0, F=1} - E_{n=1, l=0, F=0} = -2.79 \left(\frac{m_e}{m_P} \right) \frac{16}{3} \frac{\mu_B^2}{a_B^3}. \quad (21)$$

Der Übergang zwischen diesen zwei Zuständen durch Abstrahlung eines Photons erzeugt die berühmte 21 cm Spektrallinie, welche man in Kosmology und für die Suche nach Ausserirdische verwendet.