

Kap. 9:

Einblicke in die Quantentheorie

Interessanter Link:

<http://siux00.physik.uni-siegen.de/~brandt/Schroedinger>



„Those who are not shocked when they first come across quantum mechanics cannot possibly have understood it.“

Niels Bohr



*Ich mag sie nicht, und es tut mir leid,
jemals etwas damit zu tun gehabt zu haben.*

Erwin Schrödinger über die Quantenmechanik



$$|\Psi|^2$$



*Ich kann mir nicht vorstellen,
daß der Liebe Gott mit
Würfeln spielt!*
Albert Einstein

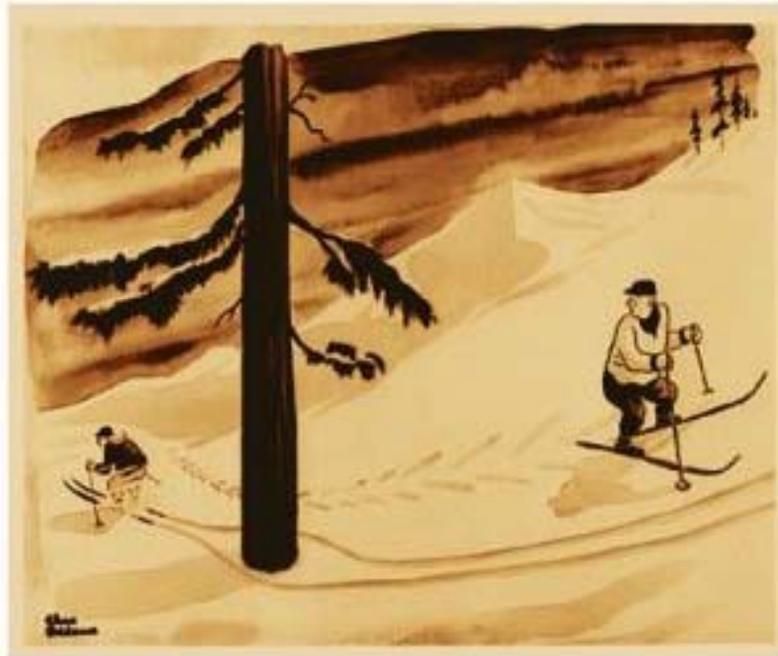
*Einstein, schreiben Sie
Gott nicht vor, was er zu
tun hat.*
Niels Henrik David Bohr

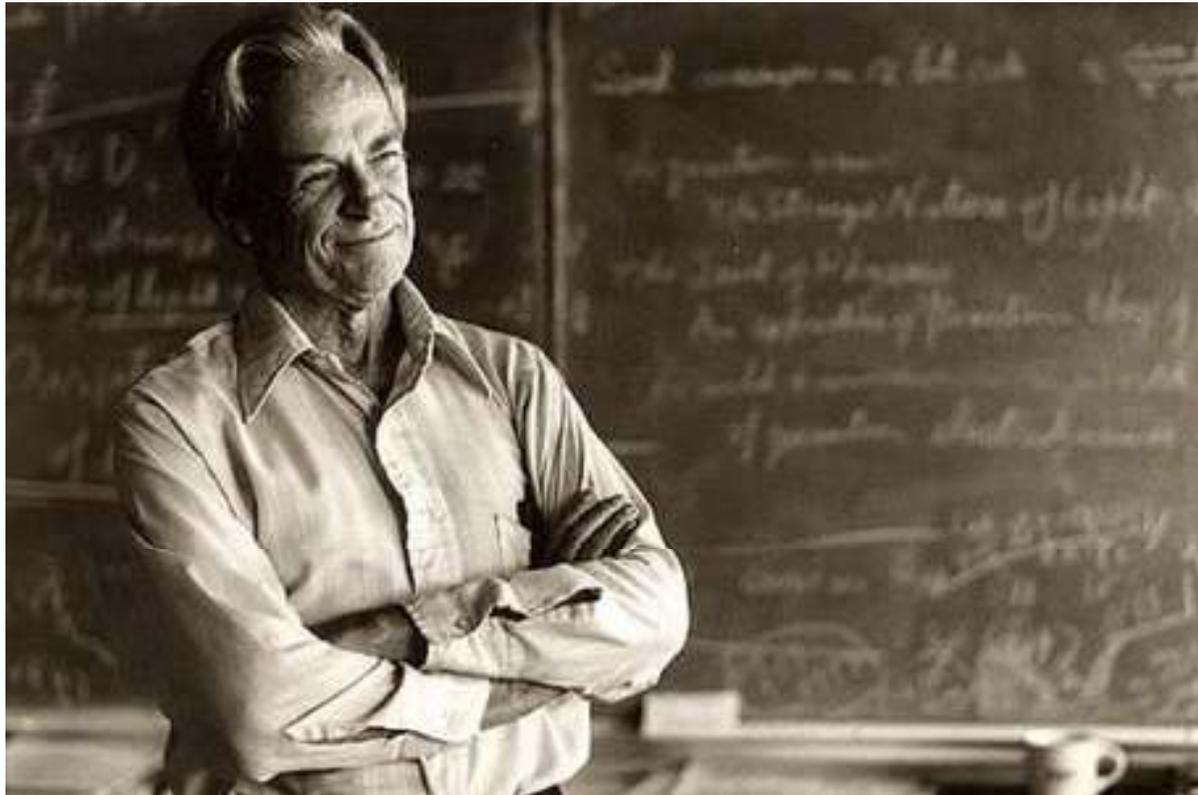
Yakir Aharonov
Daniel Rohrlich

WILEY-VCH

Quantum Paradoxes

Quantum Theory for the Perplexed





*I think it is safe to say
that no one understands quantum mechanics.*

Richard Feynman

Physikalische Größen und zugehörige Operatoren

In der Quantenmechanik werden physikalische Größen durch Operatoren dargestellt

Physikalische Größe	Operator
Ort x	x
Impuls p_x	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
Drehimpuls L_z	$-i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$
Energie (nichtrelativistisch)	$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V$

Unschärferelationen für physikalische Größen I

Zwei physikalische Größen können in einem Zustand nicht gleichzeitig scharfe Messwerte haben, wenn die Operatoren nicht miteinander kommutieren.

Es gelte für die Operatoren \vec{O} und \vec{P}

$$[\vec{O}, \vec{P}] = i\vec{Q} \quad (\text{im Spezialfall } \vec{O} = x, \vec{P} = p_x \text{ ist } \vec{Q} = \hbar)$$

Die diesen beiden Operatoren entsprechenden physikalischen Größen haben in einem beliebigen Zustand Ψ die Erwartungs- bzw. Mittelwerte

$$\langle O \rangle = \int \Psi^* \vec{O} \Psi dV \quad \langle P \rangle = \int \Psi^* \vec{P} \Psi dV .$$

Mit den neuen Operatoren

$$\Delta\vec{O} = \vec{O} - \langle O \rangle \quad \text{und} \quad \Delta\vec{P} = \vec{P} - \langle P \rangle$$

kann man leicht zeigen, dass

$$[\Delta\vec{O}, \Delta\vec{P}] = i\vec{Q}$$

Unschärferelationen für physikalische Größen II

Betrachte ein Hilfsintegral $I(\alpha)$ mit einem willkürlichen Parameter α

$$I(\alpha) = \int \left| (\alpha \Delta \vec{O} - i \Delta \vec{P}) \Psi \right|^2 dV \geq 0 \quad (\geq 0 \text{ da Integrand } \geq 0 \text{ genauer : positiv definit}).$$

Da \vec{O} und \vec{P} hermitesche bzw. selbstadjungierte Operatoren (mit reellen Eigenwerten) sind, gilt dies auch für $\Delta \vec{O}$ und $\Delta \vec{P}$. Für einen selbstadjungierten Operator \vec{R} gilt für beliebige Funktionen Λ und Φ der Variablen, auf die \vec{R} wirkt

$$\vec{R} = \vec{R}^\dagger \quad \text{bzw.} \quad \int \Phi^* \vec{R} \Lambda dV = \int \Lambda \vec{R}^* \Phi^* dV.$$

Mit $\vec{R} = \alpha \Delta \vec{O} - i \Delta \vec{P}$ und mit der Umformung $|\vec{R} \Psi|^2 = (\vec{R} \Psi)^* \vec{R} \Psi$ ergibt sich das Integral

$$I(\alpha) = \int (\vec{R} \Psi)^* \vec{R} \Psi dV = \int \Psi \vec{R} (\vec{R} \Psi)^* dV = \int \Psi \vec{R} \vec{R}^* \Psi^* dV = \int \Psi (\alpha \Delta \vec{O} - i \Delta \vec{P}) (\alpha \Delta \vec{O} + i \Delta \vec{P}) \Psi^* dV$$

$$= \int \Psi \left\{ \alpha^2 (\Delta \vec{O})^2 + i \alpha (\Delta \vec{O} \Delta \vec{P} - \Delta \vec{P} \Delta \vec{O}) + (\Delta \vec{P})^2 \right\} \Psi^* dV \geq 0$$

$$= \int \Psi \left\{ \alpha^2 (\Delta \vec{O})^2 + i \alpha (i \vec{Q}) + (\Delta \vec{P})^2 \right\} \Psi^* dV = \alpha^2 \langle (\Delta \vec{O})^2 \rangle - 2\alpha \frac{\langle \vec{Q} \rangle}{2} + \langle (\Delta \vec{P})^2 \rangle \geq 0$$

Unschärferelationen für physikalische Größen III

$$I(\alpha) = \alpha^2 \langle (\Delta \vec{O})^2 \rangle - 2\alpha \frac{\langle \vec{Q} \rangle}{2} + \langle (\Delta \vec{P})^2 \rangle \geq 0$$

Ausklammern von $\langle (\Delta \vec{O})^2 \rangle$ und quadratische Ergänzung ergibt

$$I(\alpha) = \langle (\Delta \vec{O})^2 \rangle \left(\alpha^2 - 2\alpha \frac{\langle \vec{Q} \rangle}{2 \langle (\Delta \vec{O})^2 \rangle} + \frac{\langle \vec{Q} \rangle^2}{4 \langle (\Delta \vec{O})^2 \rangle^2} \right) - \frac{\langle \vec{Q} \rangle^2}{4 \langle (\Delta \vec{O})^2 \rangle} + \langle (\Delta \vec{P})^2 \rangle \geq 0$$
$$= \langle (\Delta \vec{O})^2 \rangle \left(\alpha - \frac{\langle \vec{Q} \rangle}{2 \langle (\Delta \vec{O})^2 \rangle} \right)^2 - \frac{\langle \vec{Q} \rangle^2}{4 \langle (\Delta \vec{O})^2 \rangle} + \langle (\Delta \vec{P})^2 \rangle \geq 0$$

Diese Ungleichung muss für jeden Wert von α erfüllt sein. Dies erfordert, dass

$$-\frac{\langle \vec{Q} \rangle^2}{4 \langle (\Delta \vec{O})^2 \rangle} + \langle (\Delta \vec{P})^2 \rangle \geq 0 \quad \text{bzw.} \quad \langle (\Delta \vec{P})^2 \rangle \cdot \langle (\Delta \vec{O})^2 \rangle \geq \frac{\langle \vec{Q} \rangle^2}{4}$$

Unschärferelation

Unschärferelationen für Ort und Impuls

Anwendung der allgemeinen Form der Unschärferelation

$$\langle (\Delta \vec{P})^2 \rangle \cdot \langle (\Delta \vec{O})^2 \rangle \geq \frac{\langle \vec{Q} \rangle^2}{4}$$

$$\vec{O} = \mathbf{x}, \quad \vec{P} = \mathbf{p}_x$$

$$i\vec{Q} = [\vec{O}, \vec{P}] = [\mathbf{x}, \mathbf{p}_x] = i\hbar$$

$$\Delta \mathbf{x} = \mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle, \quad \Delta \mathbf{p}_x = \mathbf{p}_x - \langle \mathbf{p}_x \rangle$$

$$\langle (\Delta \mathbf{x})^2 \rangle \cdot \langle (\Delta \mathbf{p}_x)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

vereinfachend aufgeschrieben: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

Kugelkoordinaten

Sphärische Polarkoordinaten,

Kugelkoordinaten:

$$x = r \sin\theta \cos\phi$$

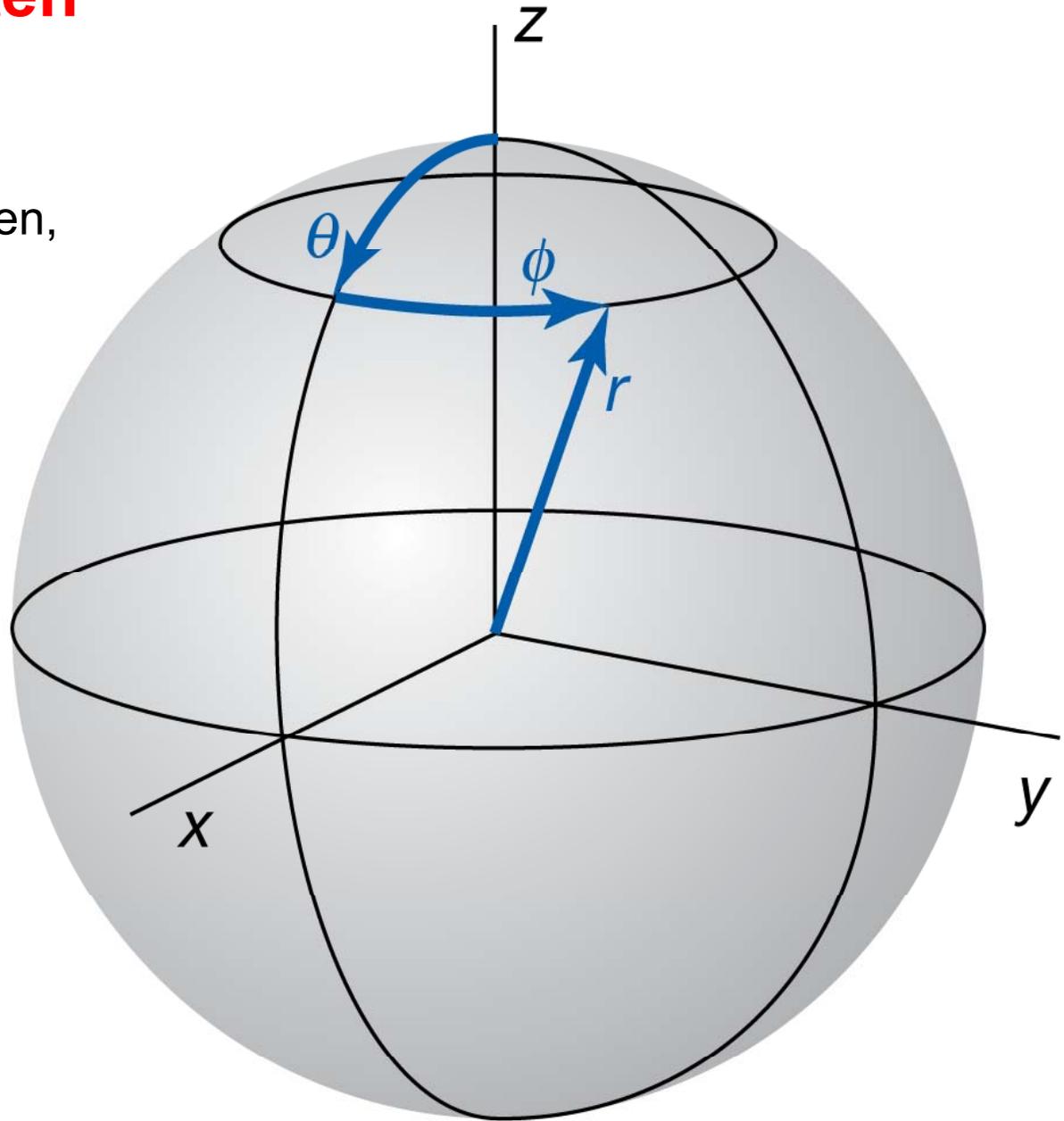
$$y = r \sin\theta \sin\phi$$

$$z = r \cos\theta$$

$$0 \leq \phi \leq 2\pi$$

$$0 \leq \theta \leq \pi$$

$$0 \leq r \leq \infty$$



Bahndrehimpuls

$$\vec{L} = \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix}$$

$$\vec{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

Operatoren:

$$L_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Kugelkoordinaten

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}$$

Bahndrehimpulse und Eigenwertgleichungen

$$\vec{L}^2 Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = \ell(\ell + 1)\hbar^2 Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$$

$$L_z Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots$$

$$m = -\ell, -\ell + 1, -\ell + 2, \dots, \ell - 1, \ell$$

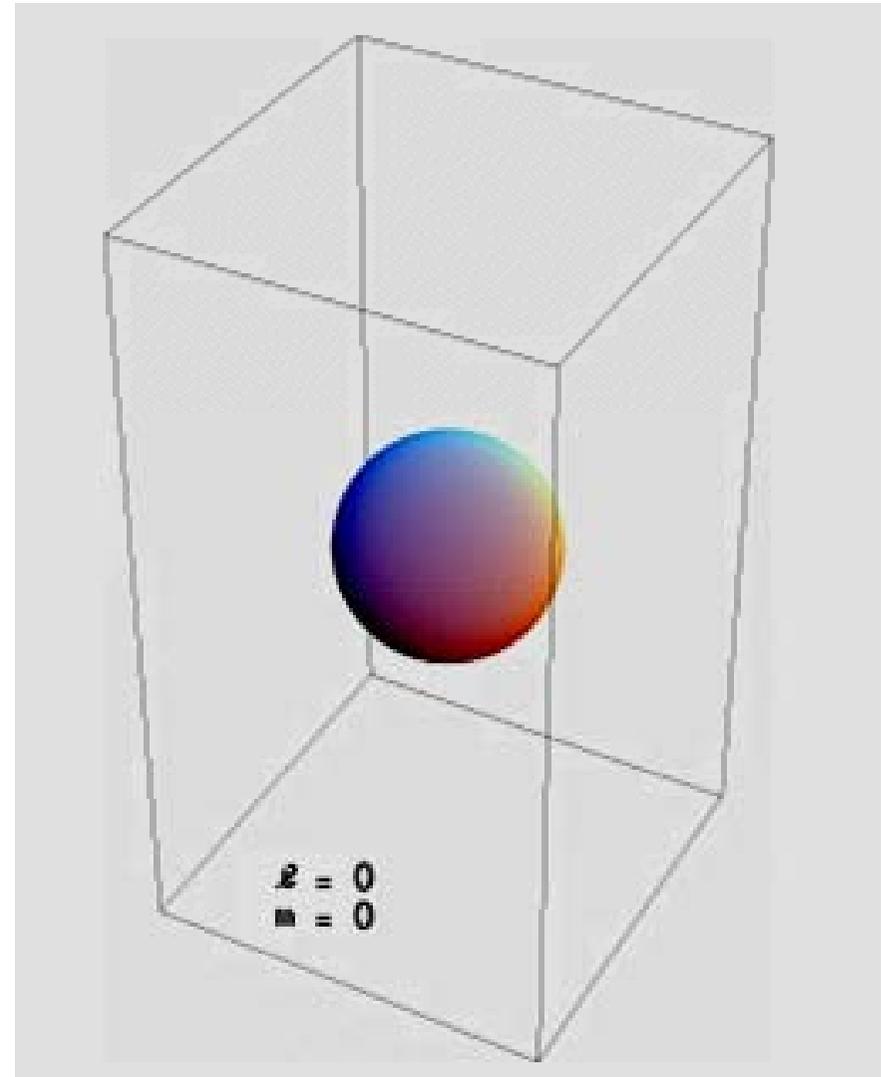
$Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$ Kugelflächenfunktionen

Kugelflächenfunktion $Y_{0,0}(\theta, \varphi)$

$$Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \text{const}$$

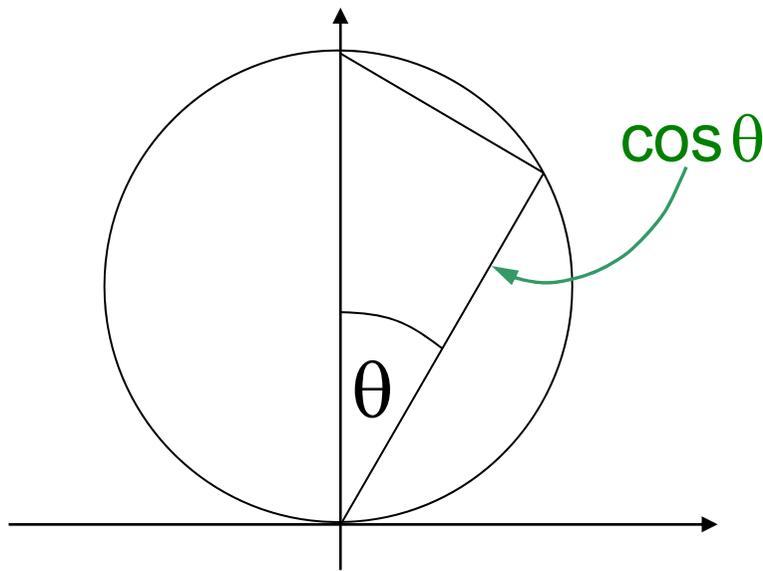
winkelunabhängig

Darstellung von $|Y_{0,0}(\theta, \varphi)|$

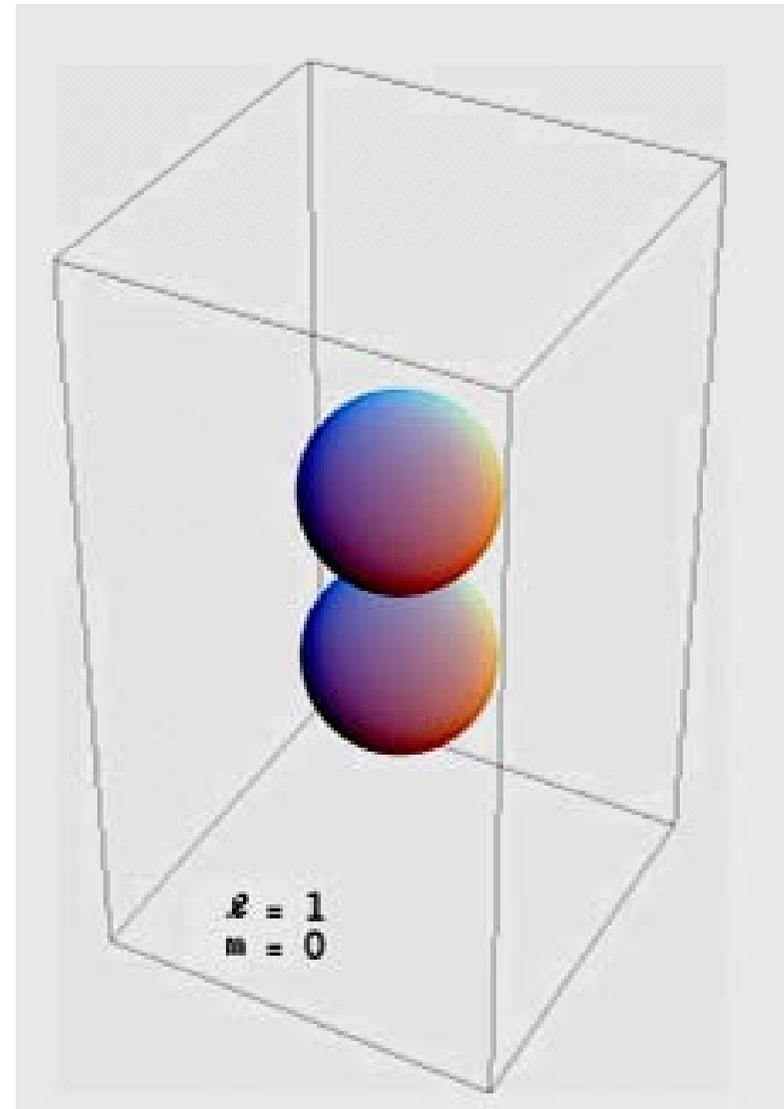


Kugelflächenfunktionen $Y_{1,0}(\theta, \varphi)$

$$Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$



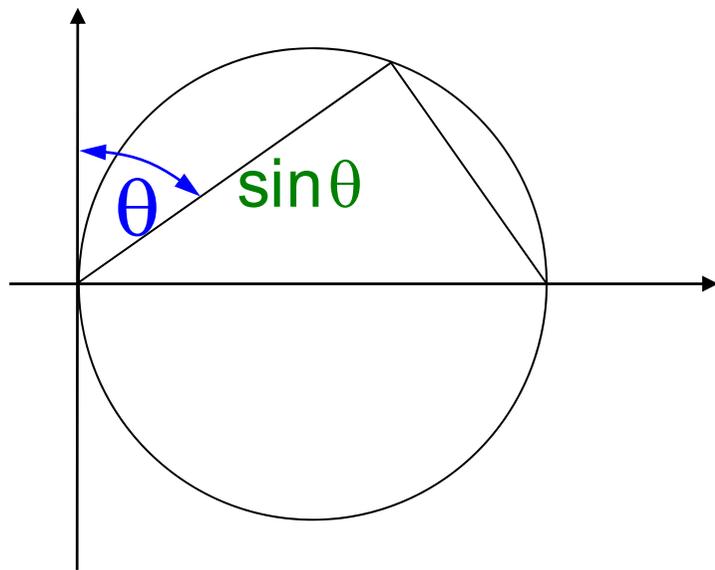
Darstellung von $|Y_{1,0}(\theta, \varphi)|$



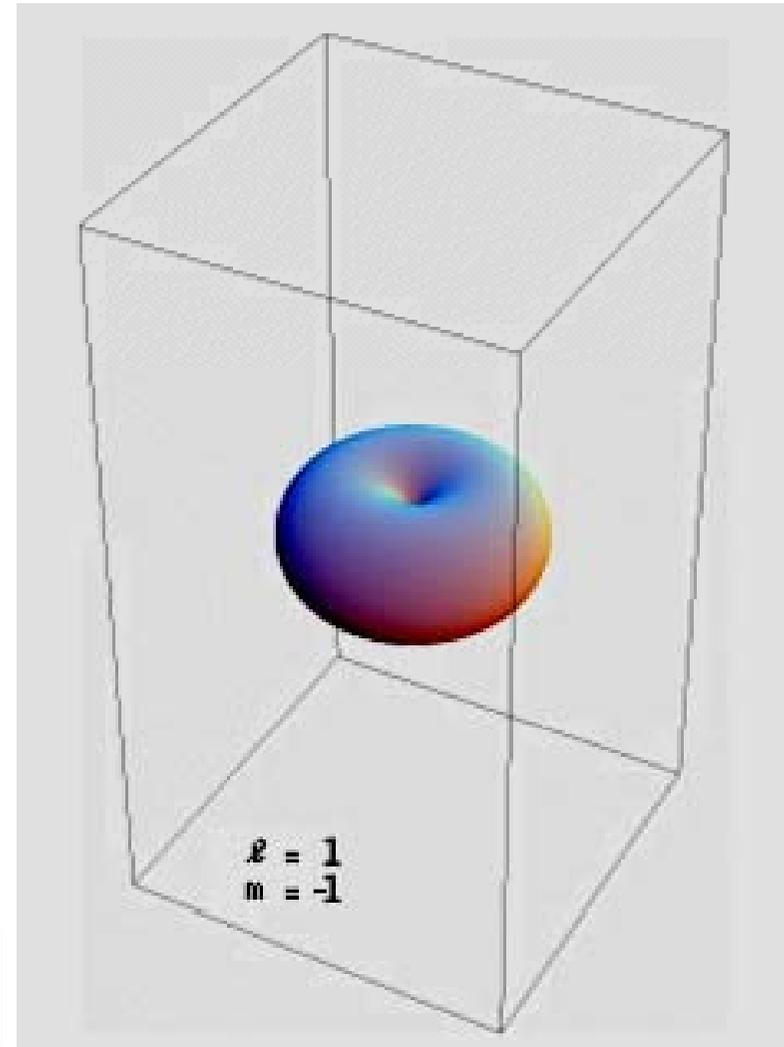
Kugelflächenfunktionen $Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi)$

$$Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\varphi}$$

$$|Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi)| = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta$$



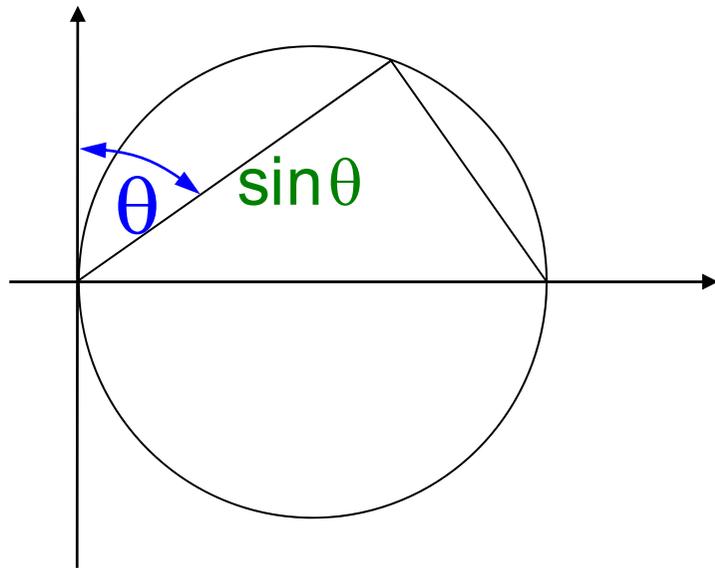
Darstellung von $|Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi)|$



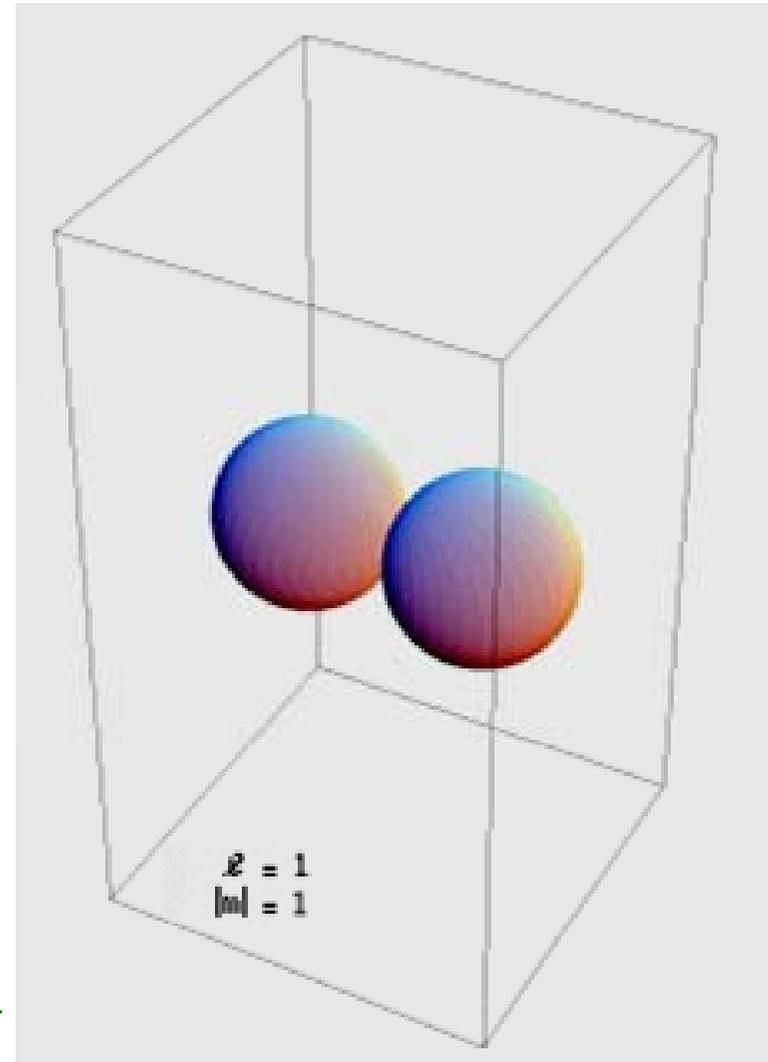
Kugelflächenfunktionen $Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi)$

$$Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\varphi}$$

$$\operatorname{Re}\{ Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) \} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \cos\varphi$$



Darstellung von $\operatorname{Re}\{ Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) \}$



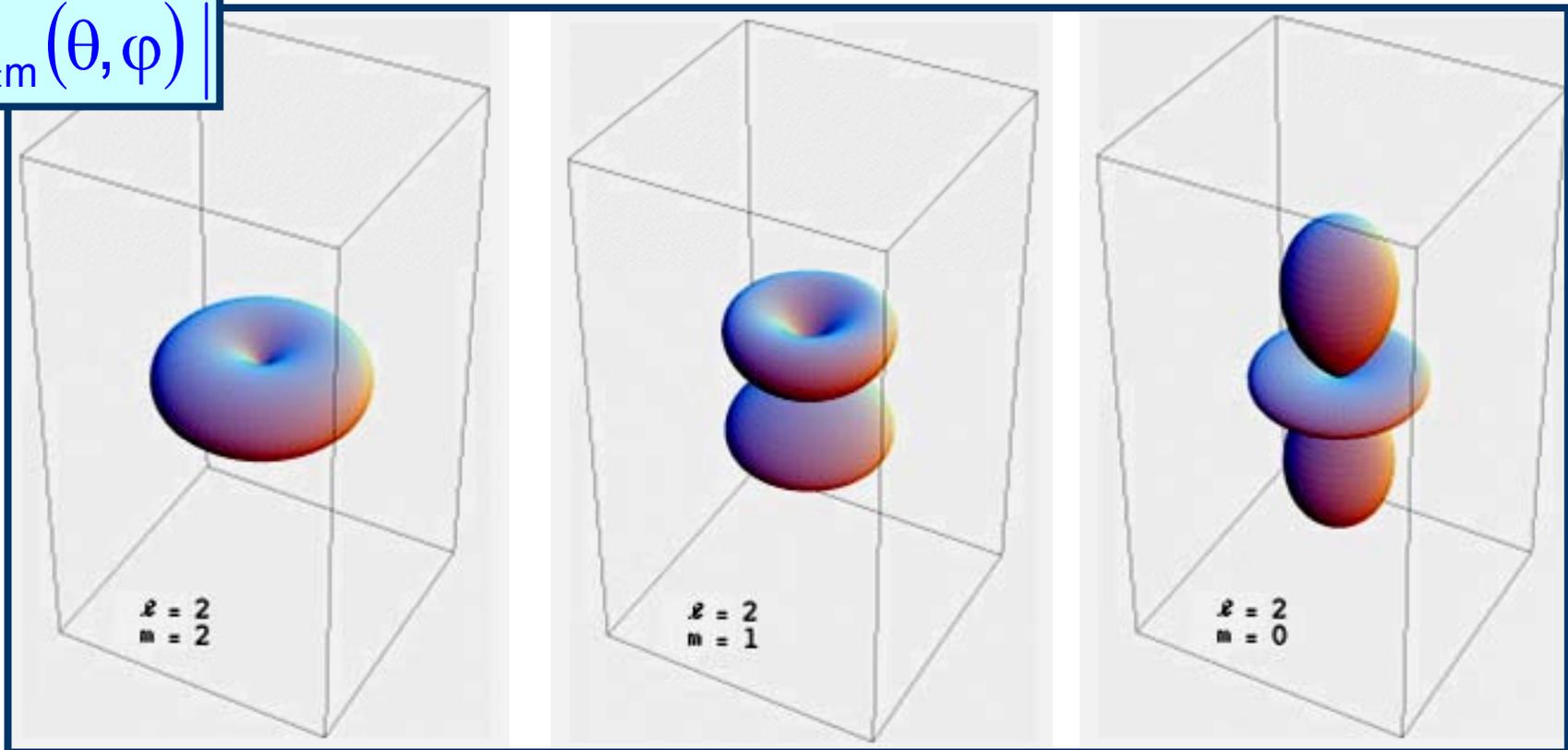
Kugelflächenfunktionen $Y_{2,\pm m}(\theta, \varphi)$

$$Y_{2,\pm 2}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$$

$$Y_{2,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$$

$|Y_{2,\pm m}(\theta, \varphi)|$

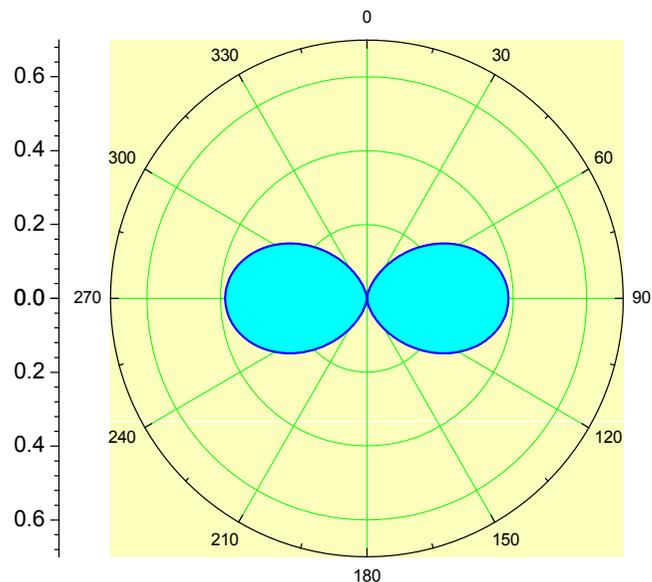


Kugelflächenfunktionen $Y_{2,\pm m}(\theta, \varphi)$

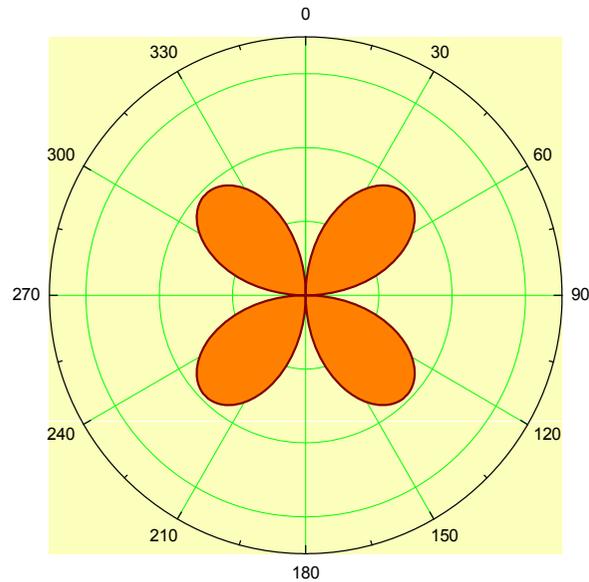
$$Y_{2,\pm 2}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi} \quad Y_{2,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$$

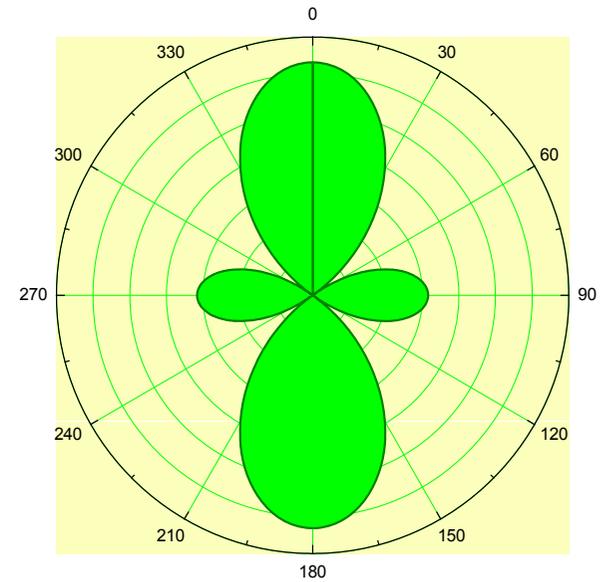
$$|Y_{2,\pm 2}(\theta, \varphi)|$$



$$|Y_{2,\pm 1}(\theta, \varphi)|$$



$$|Y_{2,0}(\theta, \varphi)|$$



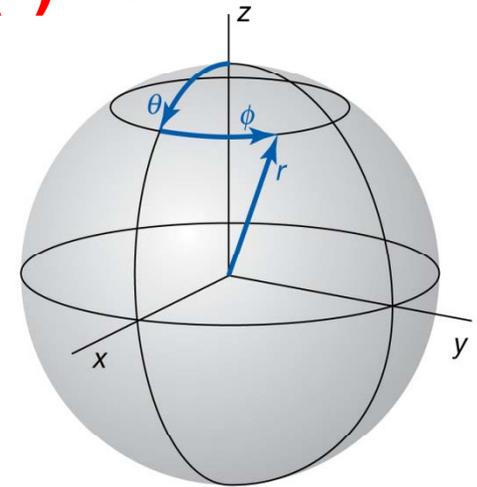
Kap. 10:

**Quantenmechanik des
Wasserstoffatoms**

Sphärisch symmetrisches Potenzial $V(r)$ I

Stationäre Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(r) \right) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$



Laplace-Operator in Kugelkoordinaten:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}$$

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\vec{L}^2}{\hbar^2 r^2}$$

Sphärisch symmetrisches Potenzial $V(r)$ II

Stationäre Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\vec{L}^2(\theta, \varphi)}{\hbar^2 r^2} \right) + V(r) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

Operator \vec{L}^2 für das Quadrat des Bahndrehimpulses:

$$\vec{L}^2 Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) = \ell(\ell + 1)\hbar^2 Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots$$

$$m = -\ell, -\ell + 1, -\ell + 2, \dots, \ell - 1, \ell$$

$Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)$ Kugelflächenfunktionen

Sphärisch symmetrisches Potenzial $V(r)$ III

Stationäre Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\vec{L}^2(\theta, \varphi)}{\hbar^2 r^2} \right) + V(r) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

Lösung:

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)$$

mit $R(r)$ aus der Radialgleichung

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] \right\} R(r) = 0$$

Radial-Wellenfunktionen im Coulomb-Potenzial I

Zu lösende Radialgleichung:

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] \right\} R(r) = 0$$

Ansatz für die Radialfunktion $R(r)$ (nach Betrachtung für $r \rightarrow \infty$)

$$R(r) = u(r) \cdot e^{-\kappa r} \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

liefert

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + 2 \left(\frac{1}{r} - \kappa \right) \frac{du}{dr} + \left[\frac{2a - 2\kappa}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u = 0$$

mit $a = \frac{mZe^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2} = \frac{Z}{a_0}$, wobei a_0 der erste Bohrsche Radius ist

Radial-Wellenfunktionen im Coulomb-Potenzial II

Noch zu lösende Differentialgleichung

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + 2 \left(\frac{1}{r} - \kappa \right) \frac{du}{dr} + \left[\frac{2a - 2\kappa}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u = 0$$

Potenzreihen-Ansatz für die Funktion $u(r)$

$$u(r) = \sum_j b_j r^j$$

liefert nach Einsetzen in die DGI. und nach Zusammenfassung der Terme mit gleichen Potenzen von r ($r^{-2}, r^{-1}, r^0, r^1, r^2, r^3, \dots$), die alle für sich verschwinden müssen, als Bedingung

$$b_j = 2 \cdot b_{j-1} \cdot \frac{\kappa \cdot j - a}{j(j+1) - \ell(\ell+1)}$$

In $u(r)$ dürfen wegen der Normierbarkeit von $R(r)$ keine beliebig hohen Potenzen auftreten, d.h. es gibt ein n , so dass $b_j=0$ für $j \geq n$,
d.h. speziell $b_n=0$ und damit (unter der Bedingung, dass ℓ maximal gleich $n-1$ ist)

$$\kappa \cdot n - a = 0 \quad \Rightarrow \quad \kappa = \frac{a}{n} = \frac{mZe^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n} = \frac{Z}{na_0}, \quad E = -\frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2$$

**liefert
Bohrsche
Energien!**

Radial-Wellenfunktionen im Coulomb-Potenzial III

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] \right\} R(r) = 0$$

Radiallösungen allgemein

$$R(r) = R_{n,\ell}(r) = N_{n,\ell} \cdot r^\ell \cdot L_{n+\ell}^{2\ell+1}(2\kappa r) \cdot e^{-\kappa r} \quad \kappa = \frac{a}{n} = \frac{Z}{na_0}$$

Normierungskonstante

$$N_{n,\ell}$$

aus

$$\int |\Psi(\vec{r})|^2 dV = 1$$

Polynome

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(x) = \frac{d^{2\ell+1}}{dx^{2\ell+1}} L_{n+\ell}(x)$$

aus den

Laguerre Polynomen

$$L_{n+\ell}(x) = e^x \frac{d^{n+\ell}}{dx^{n+\ell}} (x^{n+\ell} \cdot e^{-x})$$

Wellenfunktionen im Coulomb- Potenzial

Gesamtwellenfunktionen:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

Radiallösungen

$$R(r) = R_{n,l}(r)$$

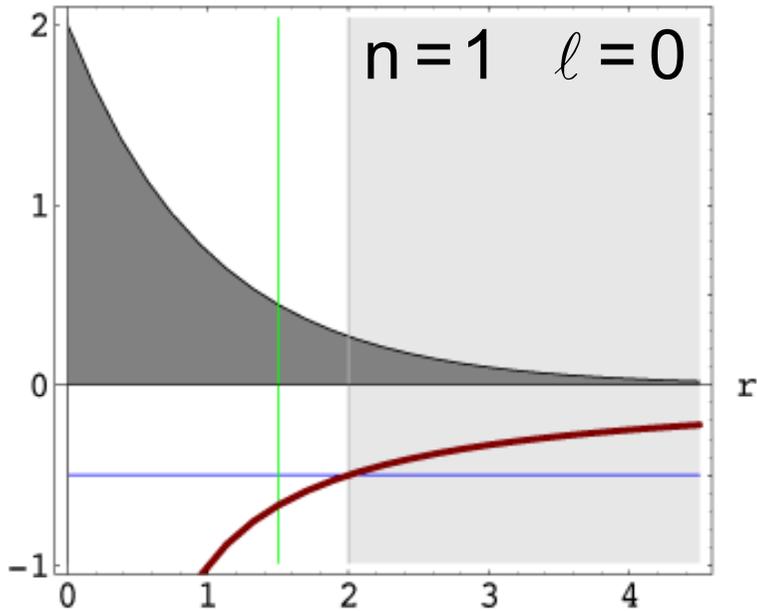
abgeleitet von den
Laguerre-Polynomen

Zahl der Knoten ($r > 0$)

$$n_r = n - l - 1$$

n	l	$R_{n,l}$
1	0	$2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \cdot e^{-Zr/a_0}$
2	0	$2 \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \cdot e^{-Zr/2a_0} \cdot \left(1 - \frac{Zr}{2a_0} \right)$
2	1	$\frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \cdot e^{-Zr/2a_0} \cdot \frac{Zr}{2a_0}$
3	0	$2 \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \cdot e^{-Zr/3a_0} \cdot \left[1 - \frac{2Zr}{3a_0} + \frac{2}{3} \left(\frac{Zr}{3a_0} \right)^2 \right]$
3	1	$\frac{2\sqrt{2}}{3} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \cdot e^{-Zr/3a_0} \cdot \frac{Zr}{3a_0} \left(2 - \frac{Zr}{3a_0} \right)$
3	2	$\frac{4}{3\sqrt{10}} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \cdot e^{-Zr/3a_0} \cdot \left(\frac{Zr}{3a_0} \right)^2$

Radialfunktionen $R_{n,l}(r)$ des Wasserstoffs I

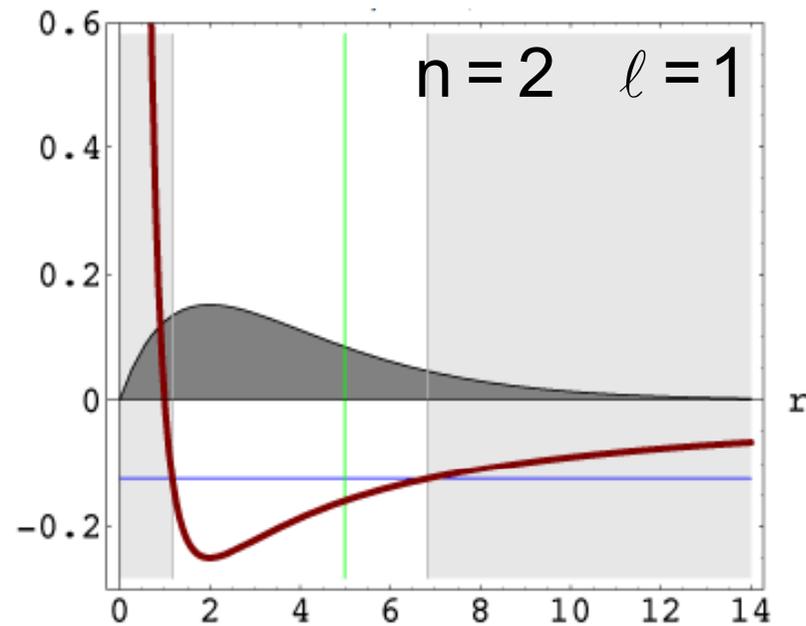
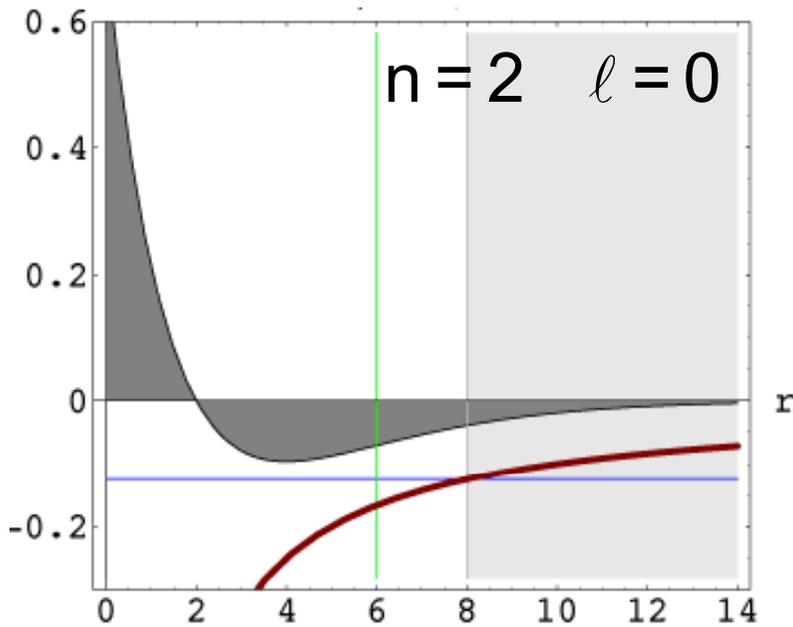


Rotbraun : effektives Potenzial

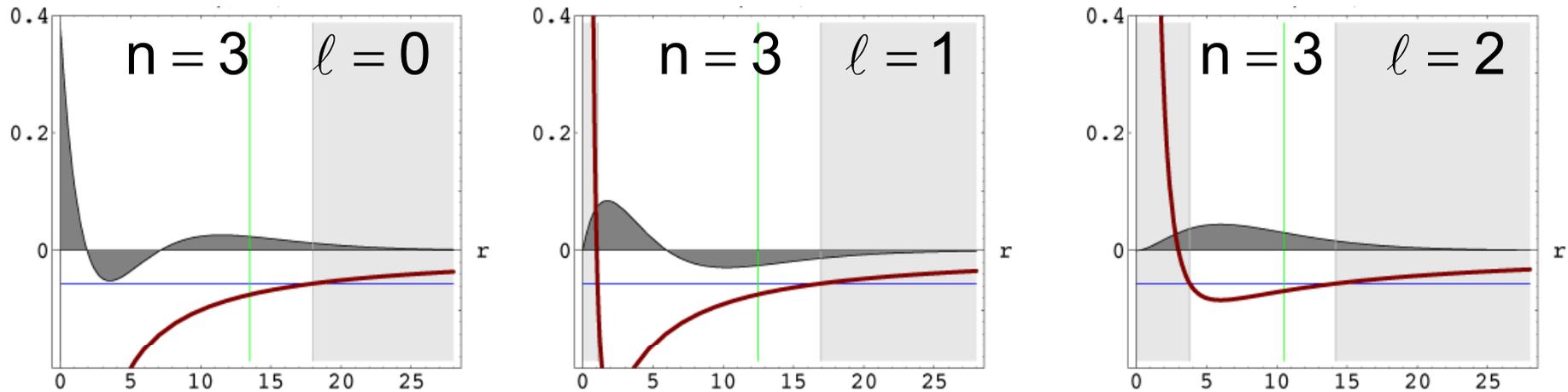
Blau : Zustandsenergie

Grün : mittlere Position $\langle r \rangle$ des e^-

$R_{n,0}(r)$: Wellenfunktion maximal am Ort des Kerns



Radialfunktionen $R_{n,l}(r)$ des Wasserstoffs II

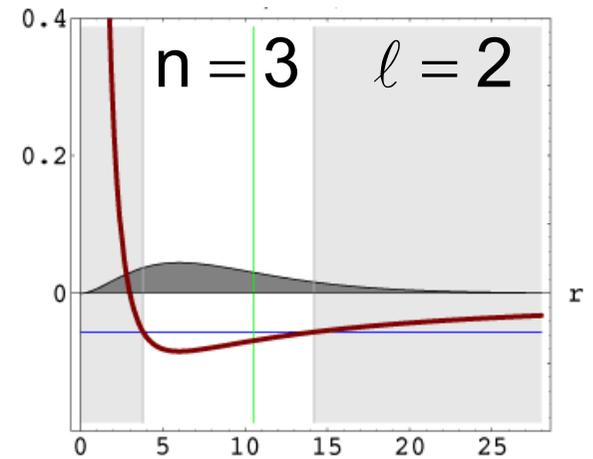
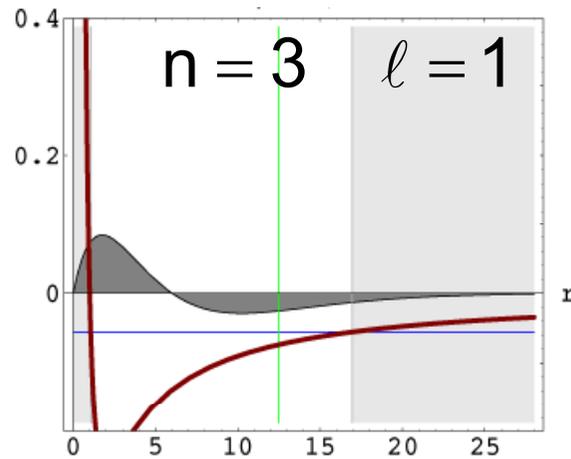
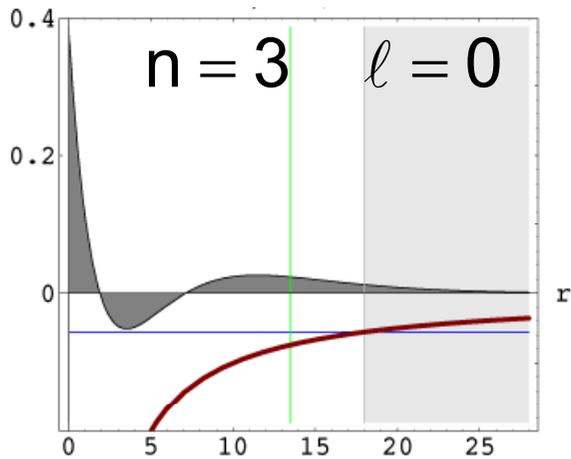


Wahrscheinlichkeit,
das Elektron in einem Volumenelement am Ort \vec{r} anzutreffen: $|\Psi(\vec{r})|^2 dV$

Wahrscheinlichkeit,
das Elektron im Abstand r vom Kern (zwischen r und $r+dr$) anzutreffen:

$$|\Psi(\vec{r})|^2 4\pi r^2 dr = 4\pi |Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)|^2 dr \cdot r^2 |R_{n,\ell}(r)|^2$$

Radialfunktionen $R_{n,l}(r)$ des Wasserstoffs III

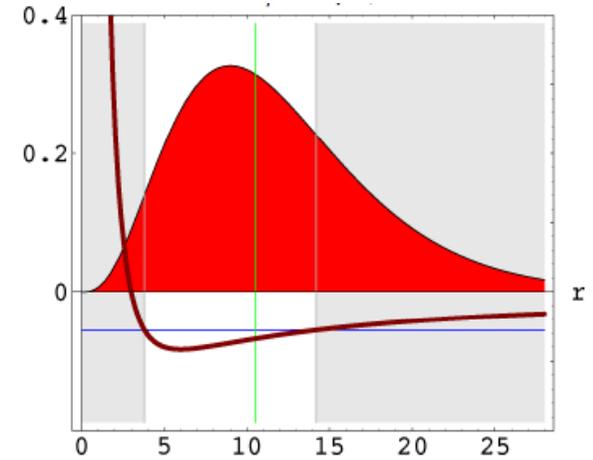
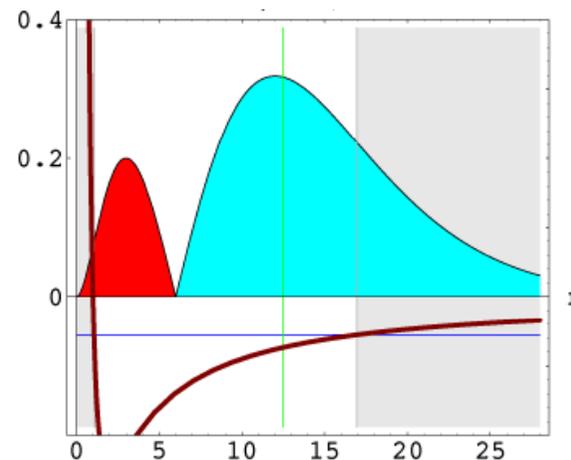
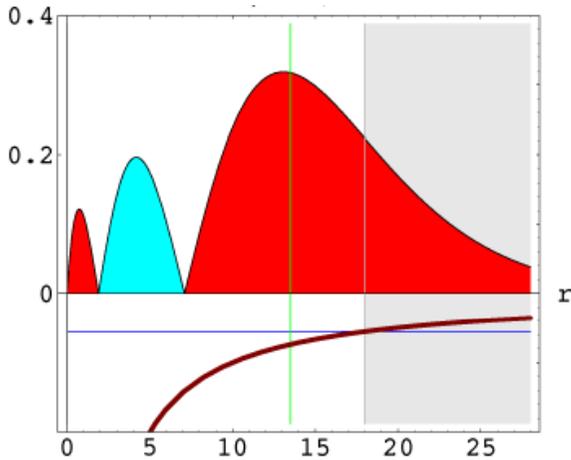


$$r \cdot |R_{3,l}(r)| = \sqrt{r^2 \cdot |R_{3,l}(r)|^2}$$

$l = 0$

$l = 1$

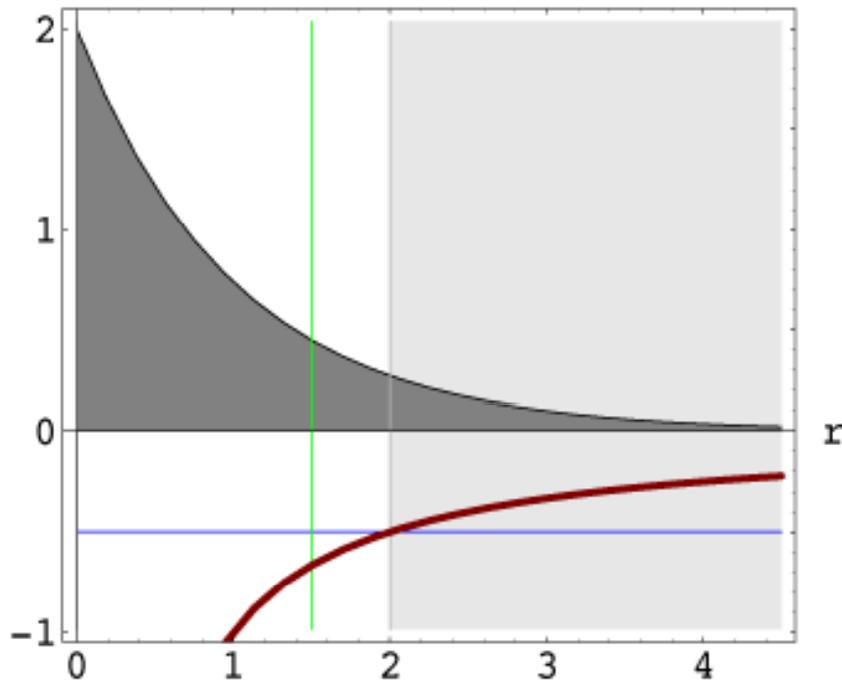
$l = 2$



Wellenfunktion $\Psi_{1,0,0}(r, \theta, \varphi)$ des Wasserstoffs I

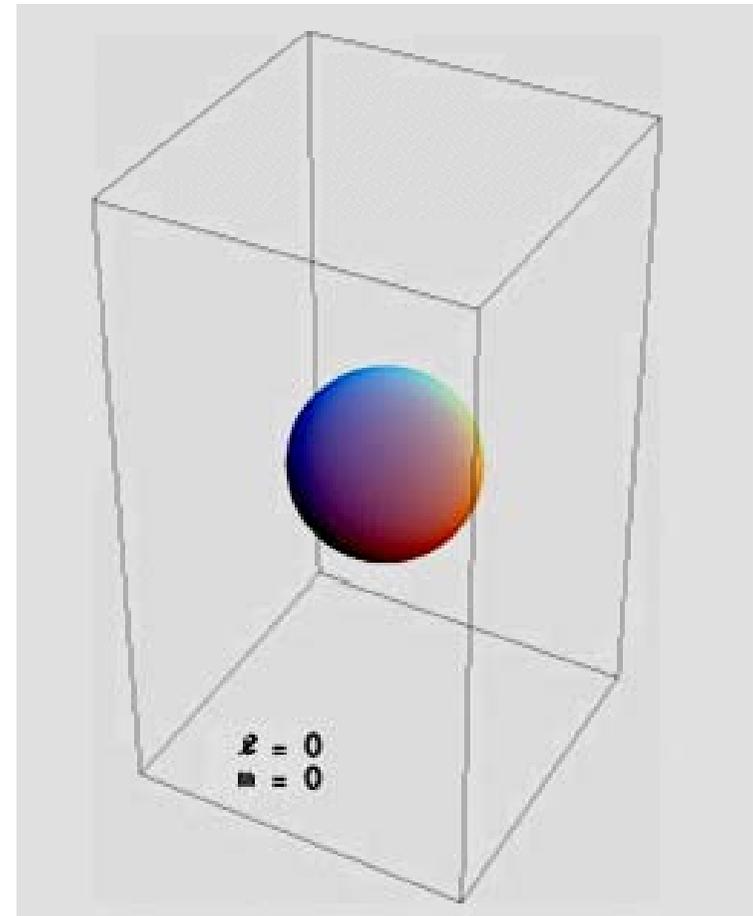
Radialanteil

$$R_{n,l}(r) = 2 \times \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \times e^{-r/a_0}$$



Winkelanteil

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$



Wellenfunktion $\Psi_{1,0,0}(r, \theta, \varphi)$ des Wasserstoffs II

Dargestellt ist die
Wahrscheinlichkeitsdichte

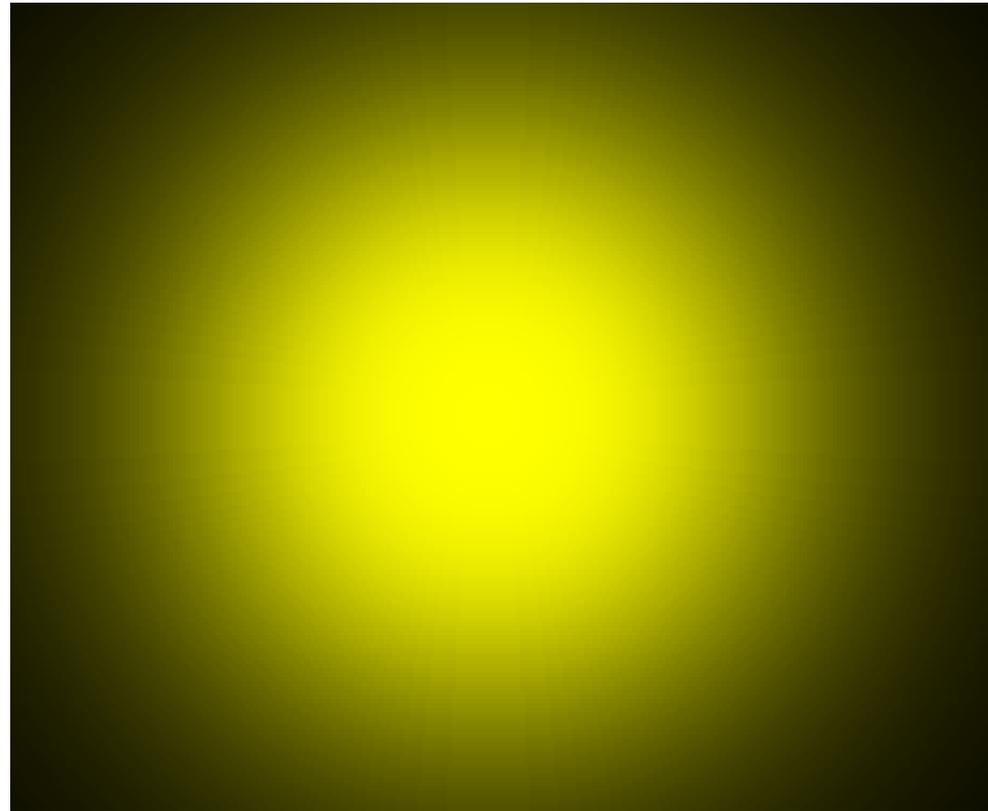
$$|\Psi_{1,0,0}|^2$$

Die Wahrscheinlichkeit, in einem vorgegebenen, ortsunabhängigen Probevolumen dV das Elektron anzutreffen ist

$$|\Psi_{1,0,0}|^2 dV$$

Diese Wahrscheinlichkeit ist am größten, wenn $r=0$ ist, d.h. am Ort des Kerns. Versucht man mit einer „Schöpfkelle des Volumens dV “ das Elektron zu fangen, dann hat man am Kernort die beste Chance.

„Dichtewolke“ des 1s Elektrons



Wahrscheinlichkeitsdichte des Elektrons im Grundzustand des Wasserstoffatoms

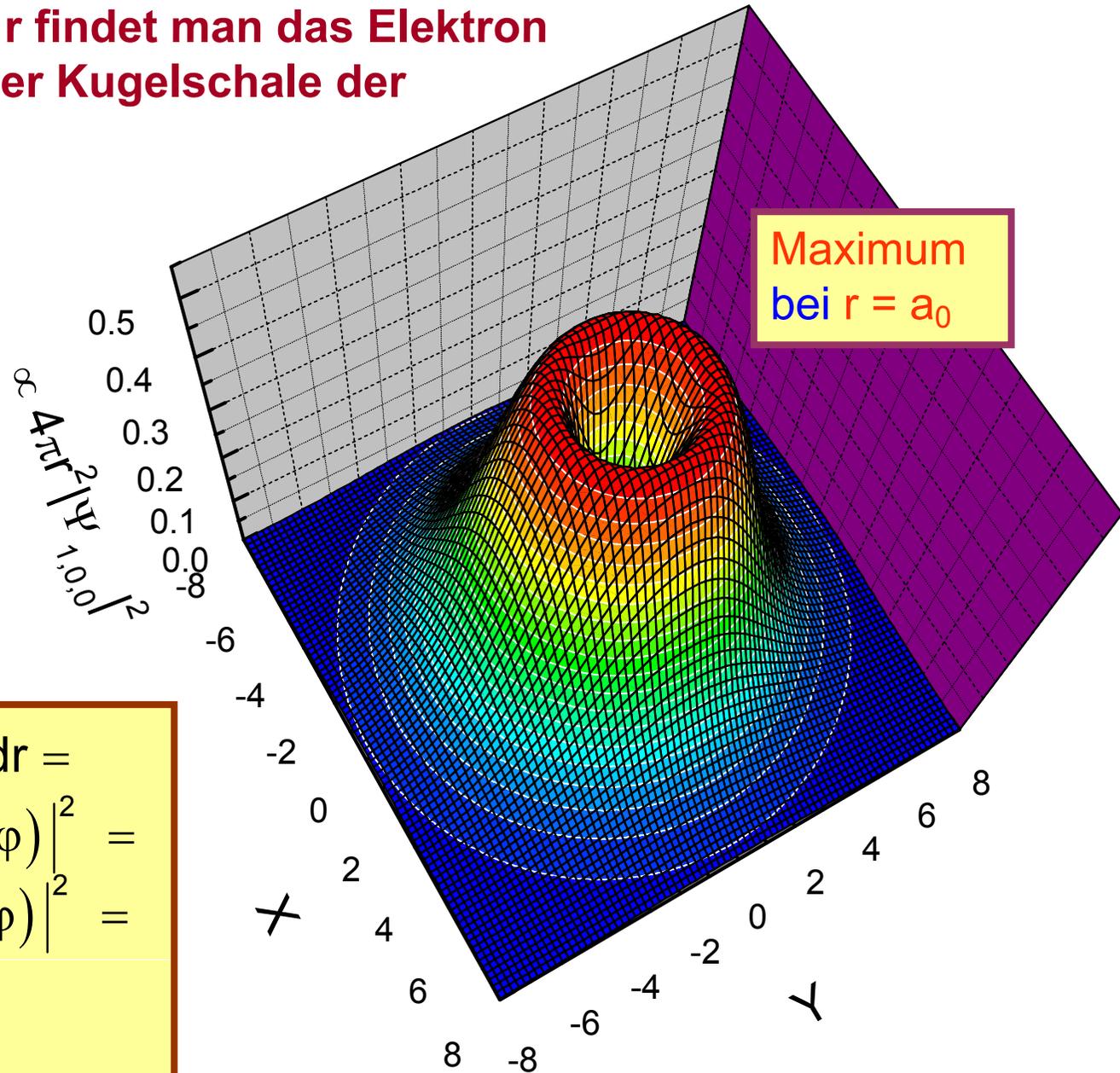
$$|\Psi_{1,0,0}(r, \theta, \varphi)|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right)$$

Wellenfunktion $\Psi_{1,0,0}(r, \theta, \varphi)$ des Wasserstoffs III:

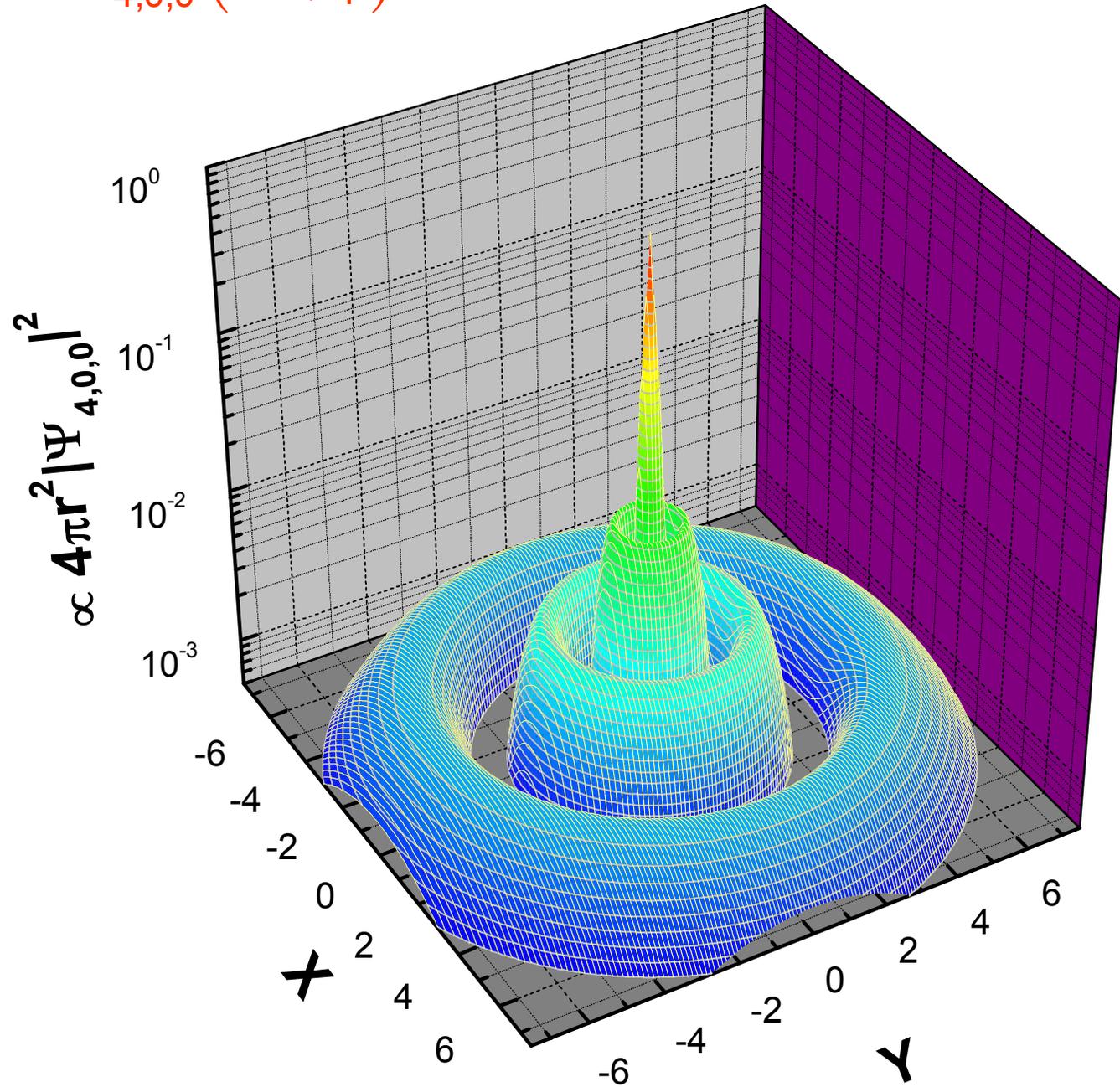
in welchem Abstand r findet man das Elektron am leichtesten in einer Kugelschale der Dicke dr ?

Das Volumen der jetzt benutzten „Schöpfkelle“, einer Kugelschale, ist dieses mal $4\pi r^2 dr$, wächst also auch bei konstantem dr quadratisch mit r . Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron mit dieser Kelle zu fangen ist also

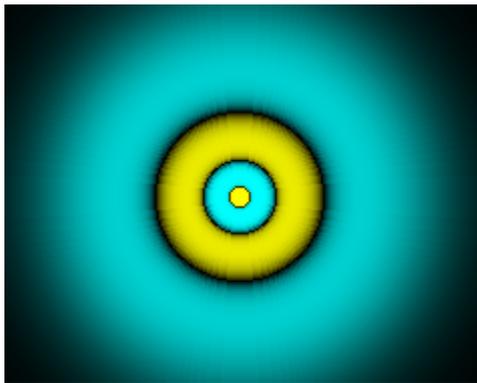
$$\begin{aligned} |\Psi|^2 dV &= |\Psi_{n,l,m}|^2 4\pi r^2 dr = \\ 4\pi r^2 dr |R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 &= \\ 4\pi r^2 dr |R_{1,0}(r) Y_{0,0}(\theta, \varphi)|^2 &= \\ \frac{4}{a_0^3} dr \cdot r^2 e^{-2r/a_0} & \end{aligned}$$



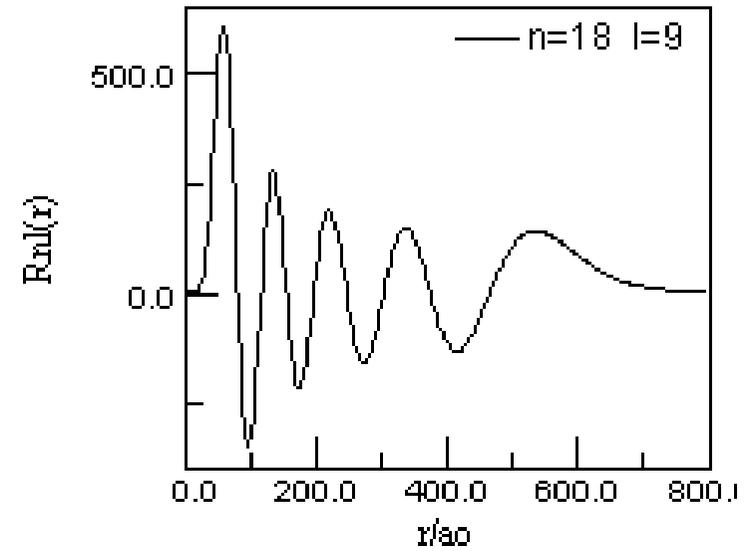
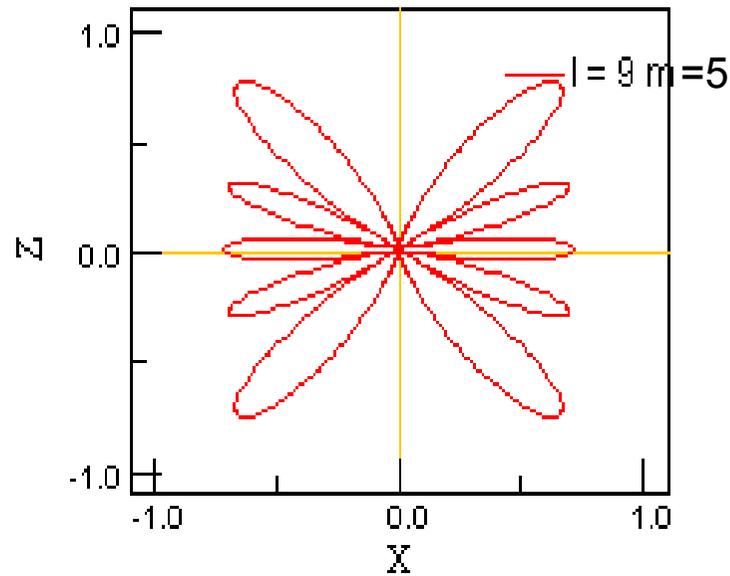
Wellenfunktion $\Psi_{4,0,0}(r, \theta, \varphi)$ des Wasserstoffs



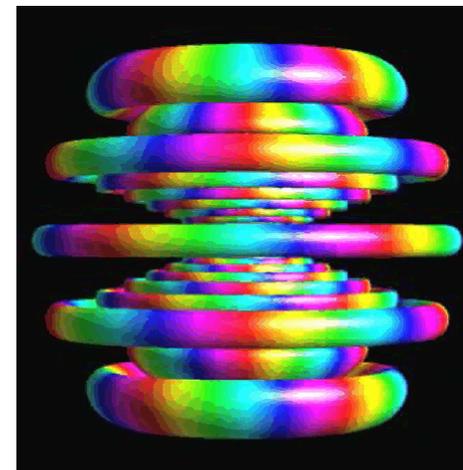
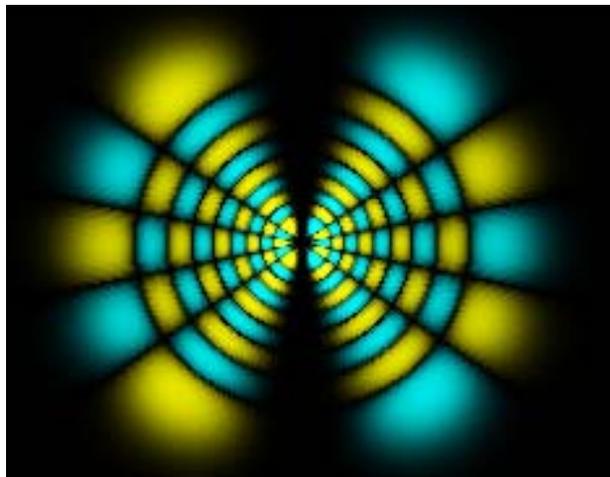
Schnitt durch die „Dichtewolke“ des 4s Elektrons



Wellenfunktion $\Psi_{18,9,5}(r, \theta, \varphi)$ des Wasserstoffs



Knoten in Winkel- und Radialanteil



Beschreibung des H-Atoms, bzw. H-ähnlicher Ionen



Johann Jakob Balmer
(1825-1898)



Niels Bohr (1885-1962)



Erwin Schrödinger
(1887-1961)

$$E_n = -\frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \right)^2 m_e \frac{m_K}{m_e + m_K} \frac{Z^2}{n^2} = R_\infty hc \frac{m_K}{m_e + m_K} \frac{Z^2}{n^2}$$

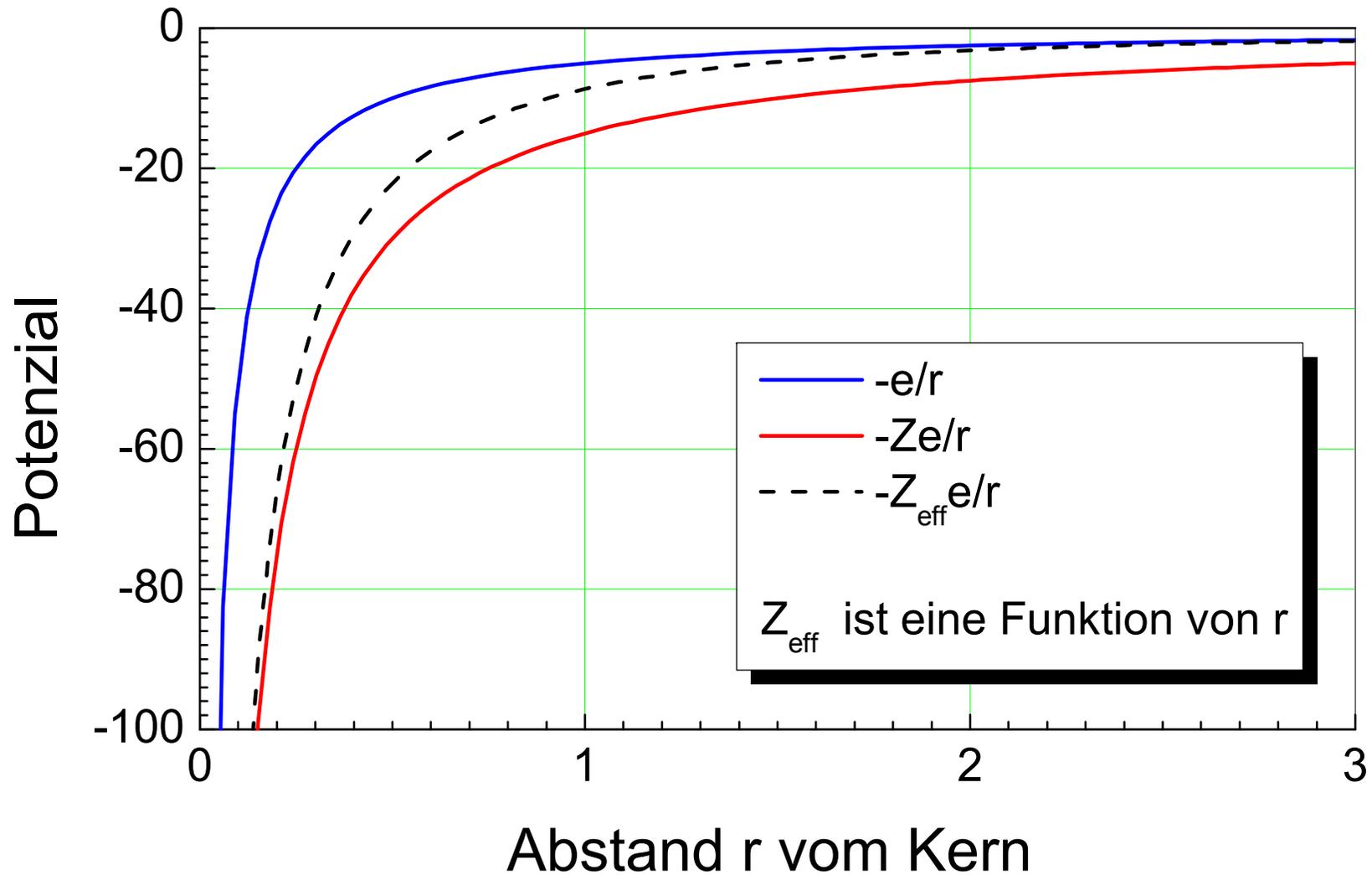
$$R_\infty hc = 13.605\,691\,93(34) \text{ eV}$$

NIST 2007

Kap. 11:

**Alkali-Atome und Aufhebung der
I-Entartung**

Alkali-Atome und effektives Potenzial

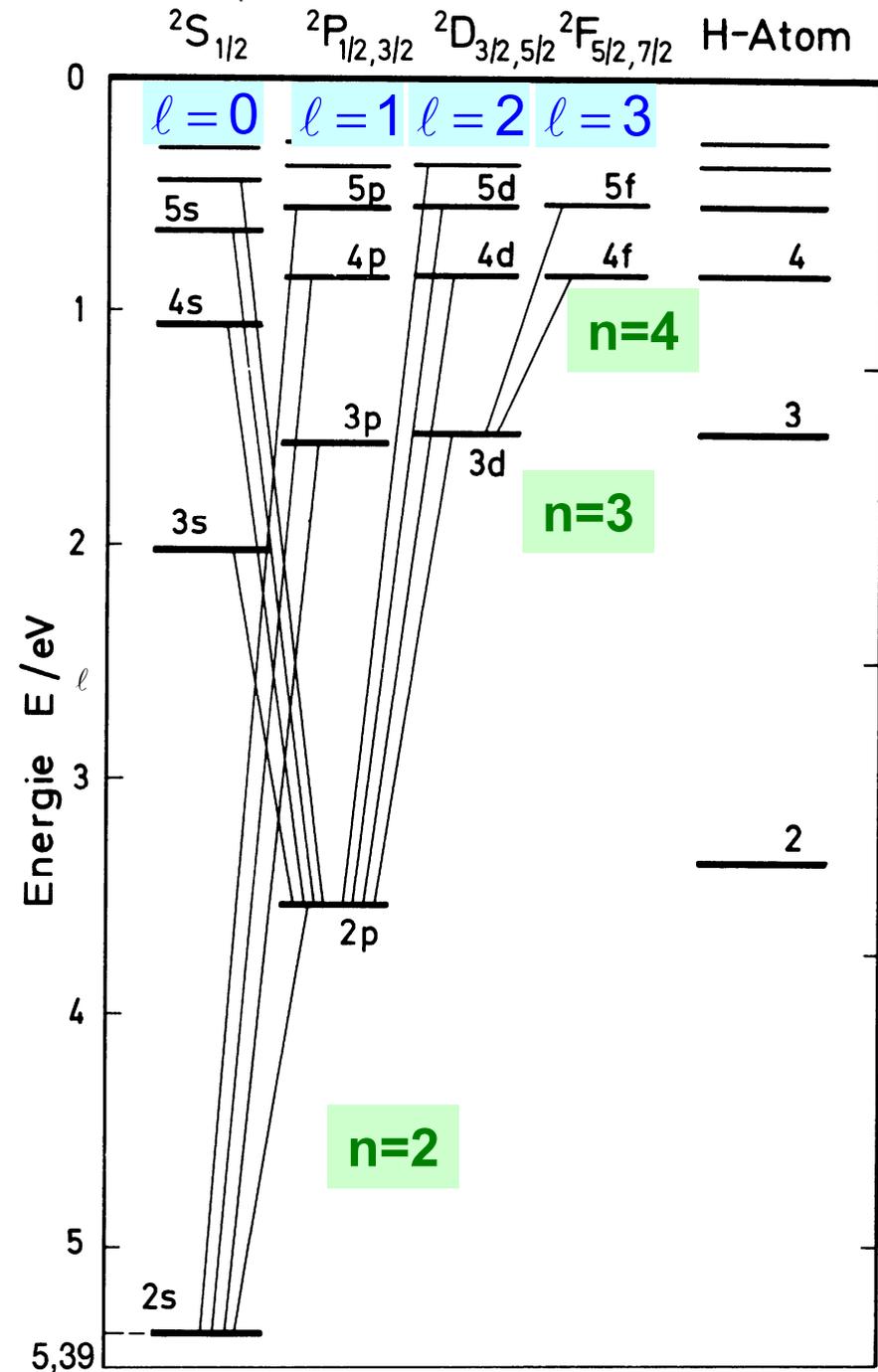


Resultat: Aufhebung der Bahndrehimpuls-Entartung

Termschema des Lithium Atoms: Aufhebung der l - Entartung

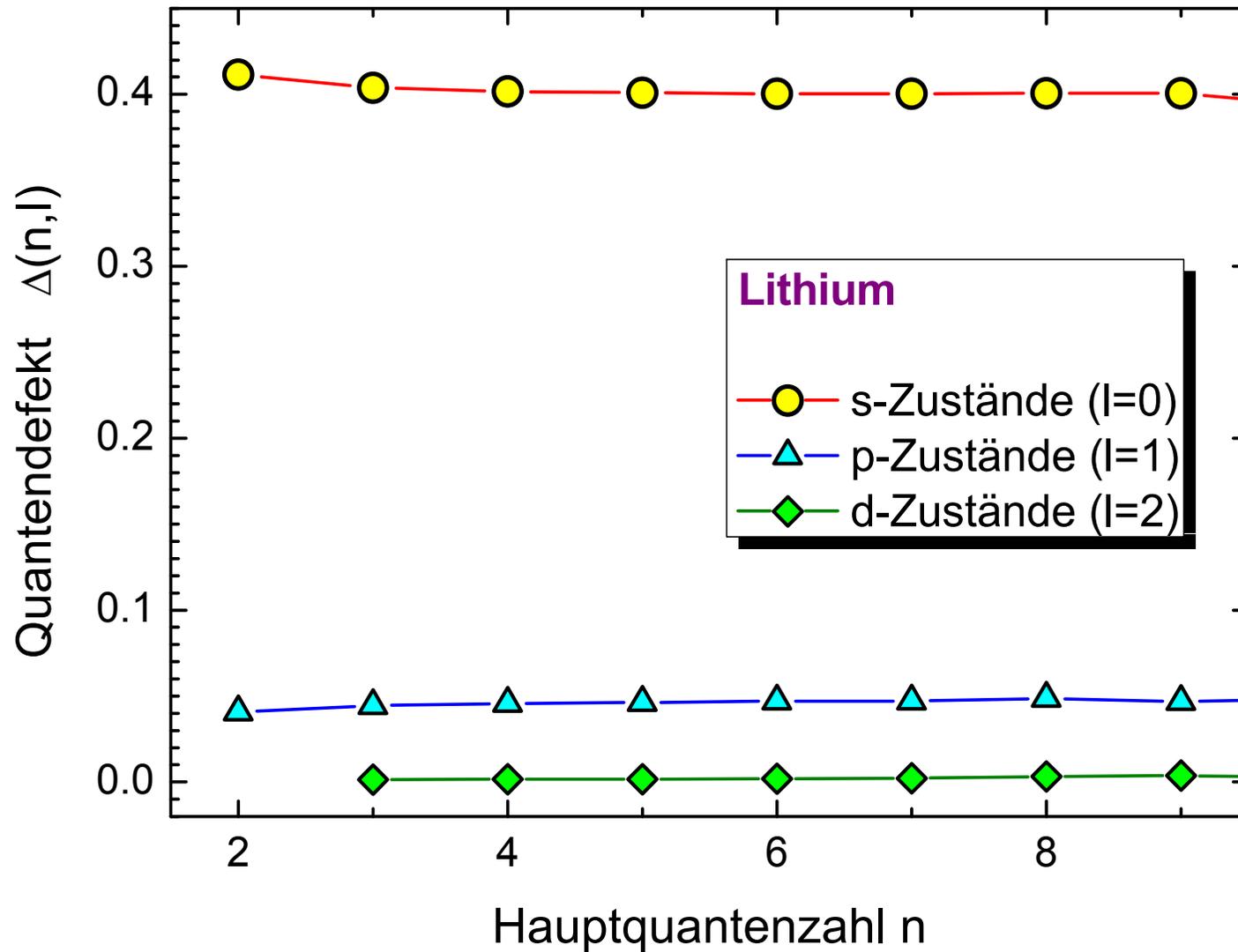
$$E_{n,l} = \frac{-13.6046 \text{ eV}}{[n - \Delta(n,l)]^2}$$

$\Delta(n, l)$ Quantendefekt



Quantendefekte im Lithium Atom

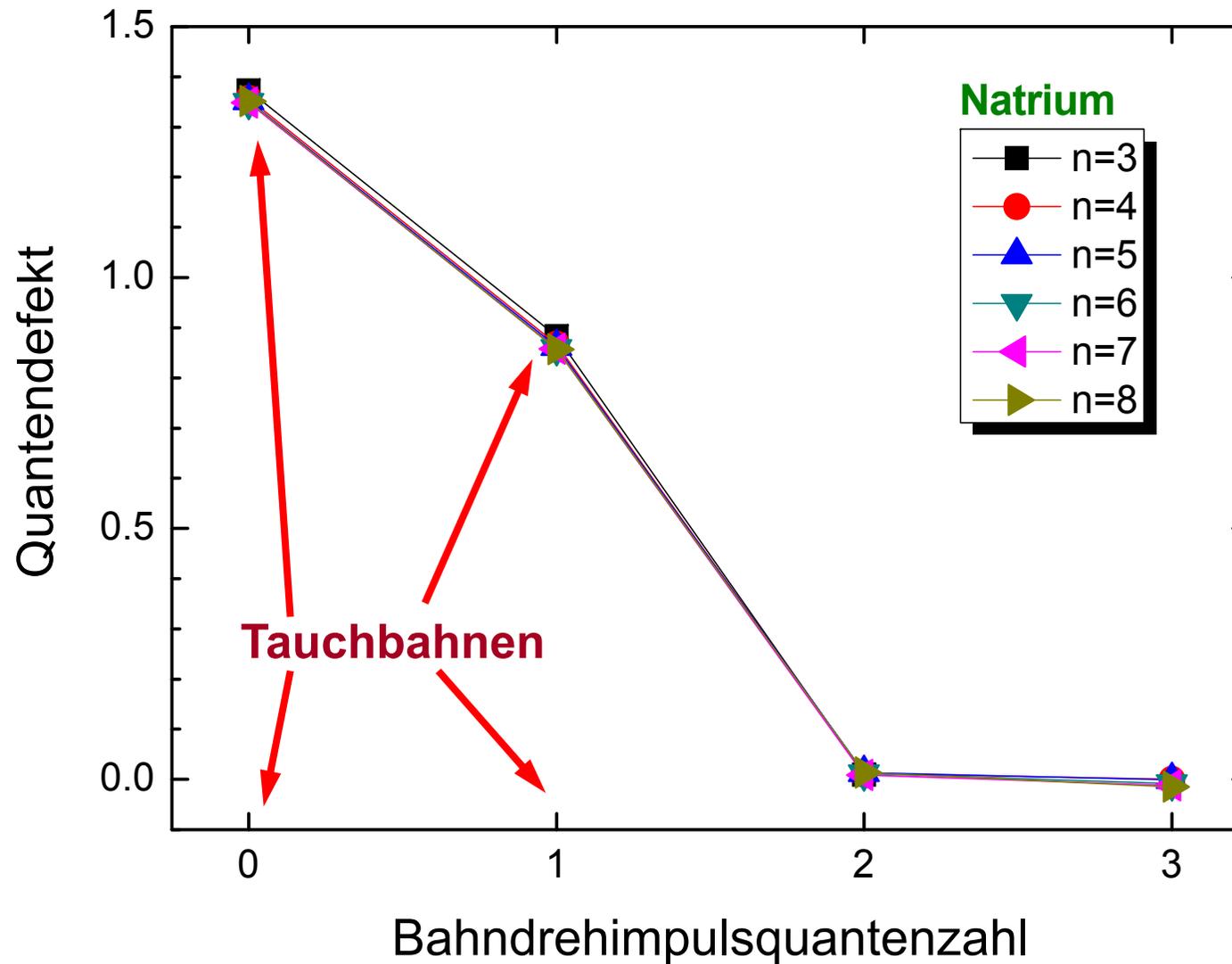
geringe n-Abhängigkeit



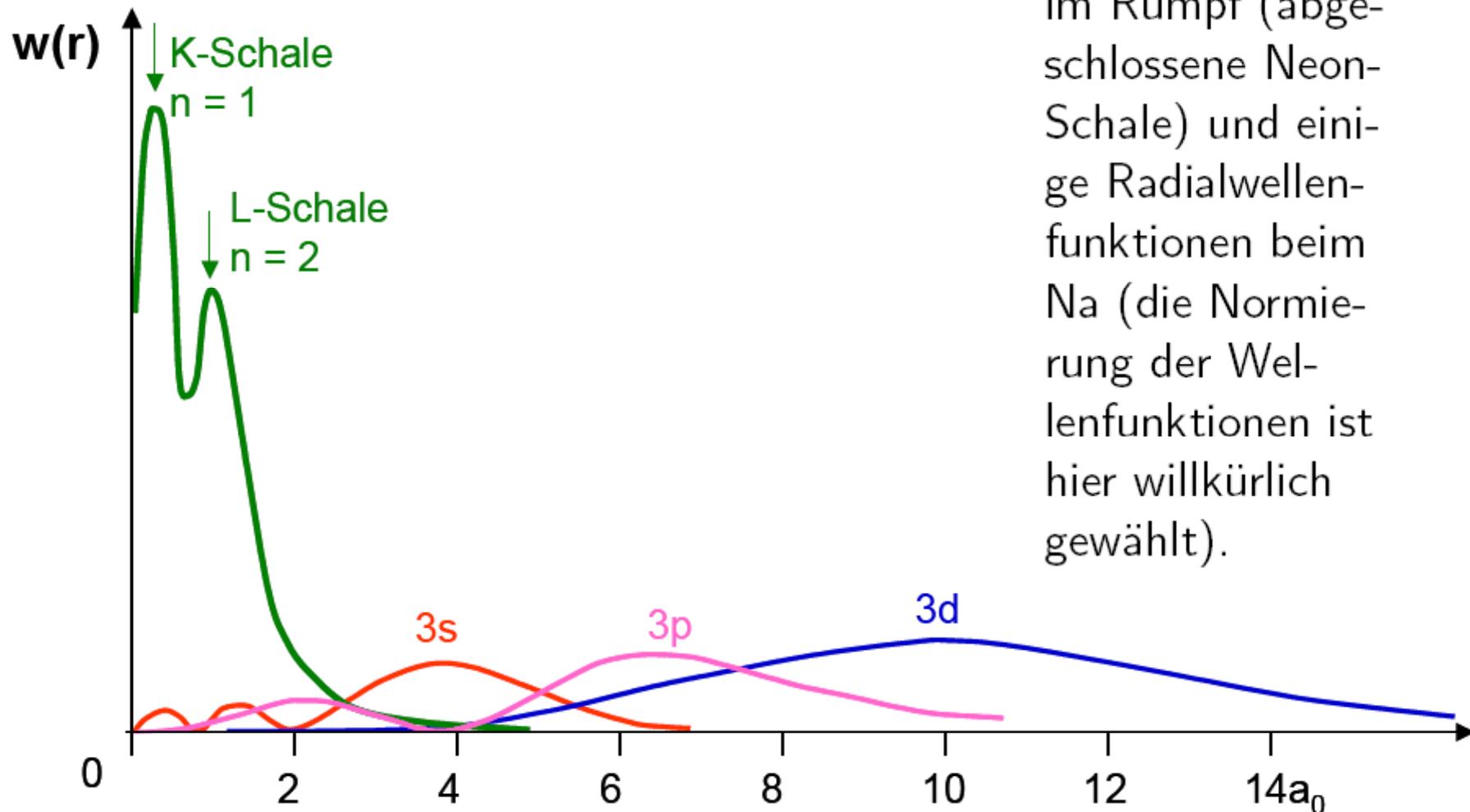
Quantendefekte im Natriumatom

geringe Abhängigkeit von der Hauptquantenzahl

starke Abhängigkeit von der Bahndrehimpulsquantenzahl



Wellenfunktionen im Natrium



Ladungsverteilung im Rumpf (abgeschlossene Neon-Schale) und einige Radialwellenfunktionen beim Na (die Normierung der Wellenfunktionen ist hier willkürlich gewählt).

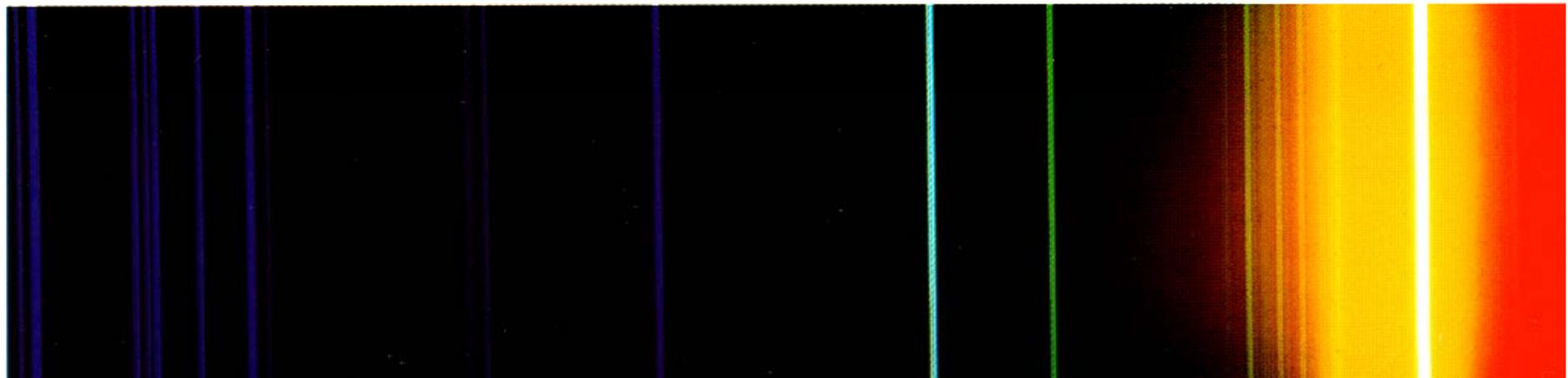
Lichtemission des Natriums

Experiment

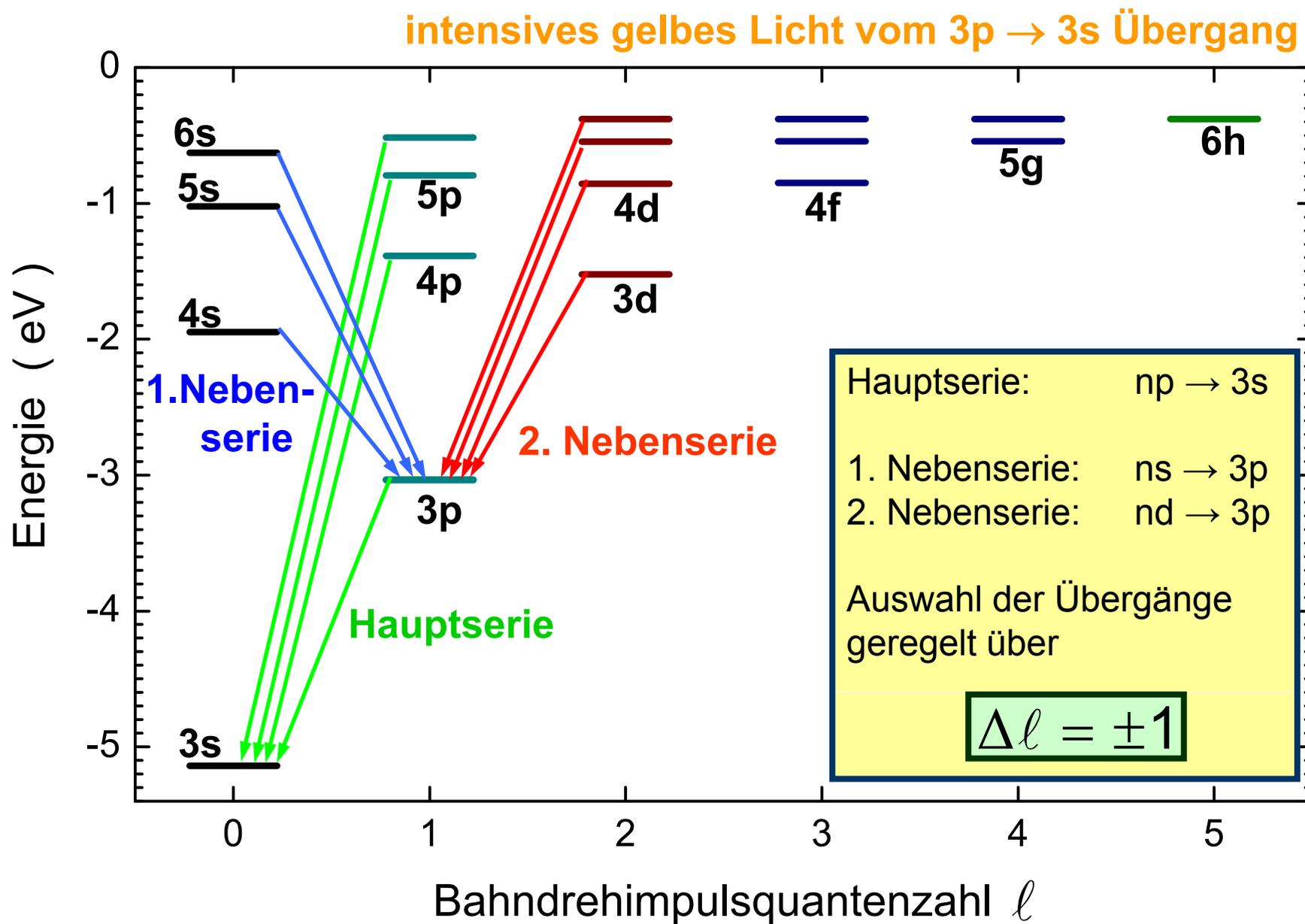
Gitterspektrum einer
Natriumdampf Lampe
mittlere Auflösung



Natrium D Linie überstrahlt das gemessene Spektrum



Termschema des Natriums



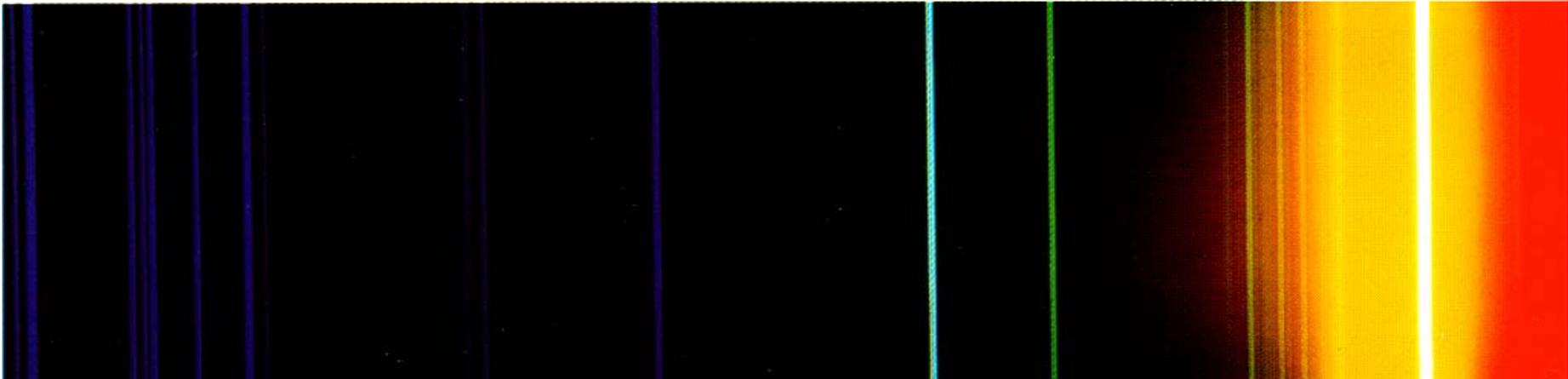
Kap. 12:

**Bahn- und Spin-Magnetismus,
Feinstruktur**

Linienpektrum des Natriums: Duplettstrukturen

Experiment

Gitterspektrum einer Natriumdampflampe



Na D Linie:

$3p \rightarrow 3s$ Übergang
zeigt Duplettstruktur

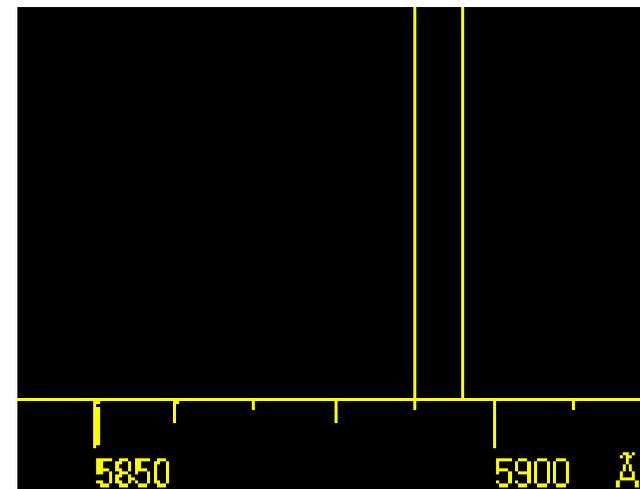
$\lambda_1 = 589.5930$ nm

$\Delta\lambda/\lambda \approx 0.001$

2 meV bei 2.09 eV

$\lambda_2 = 588.9963$ nm

hohe Auflösung

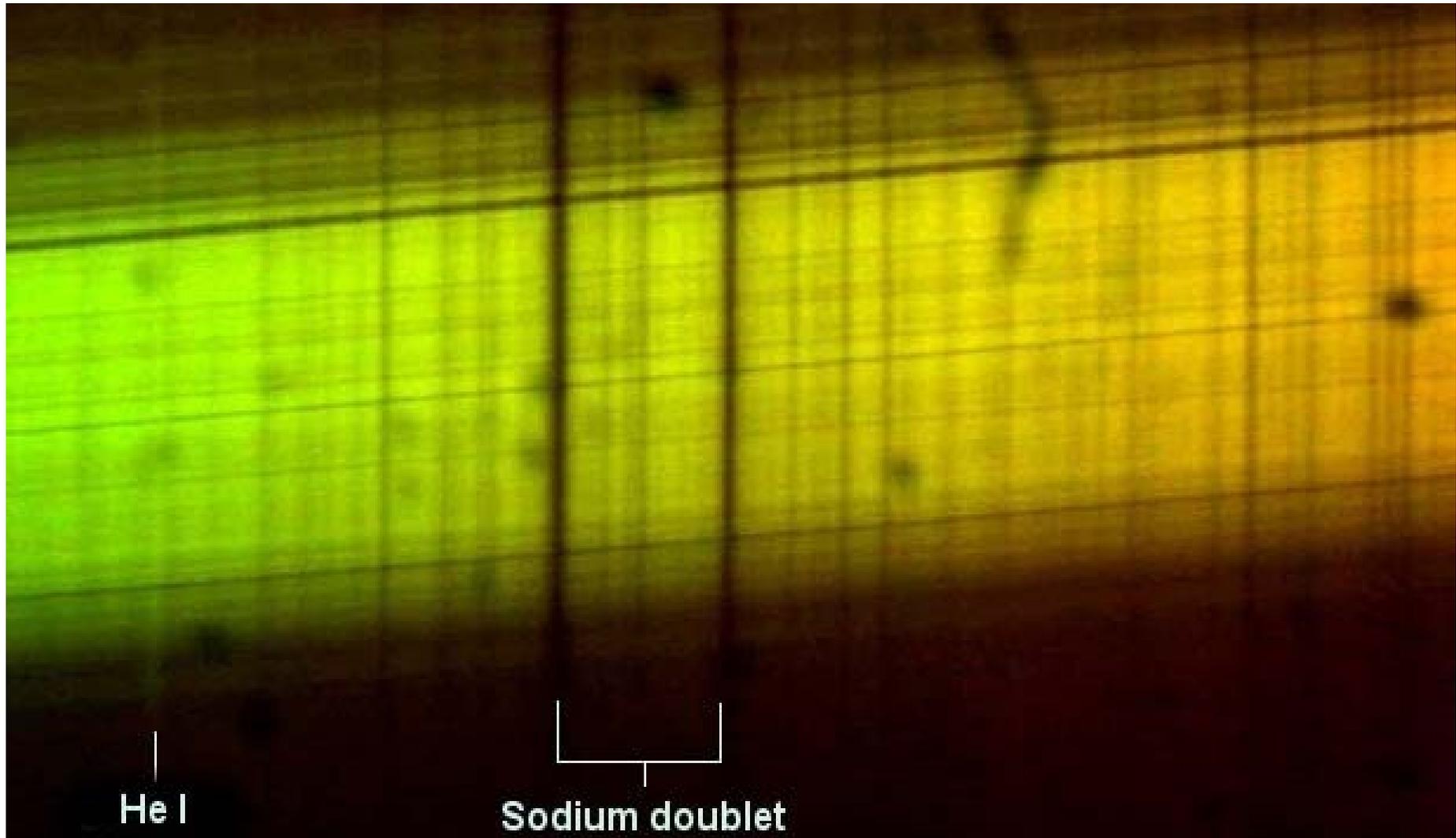


Natrium D-Linie in Absorption

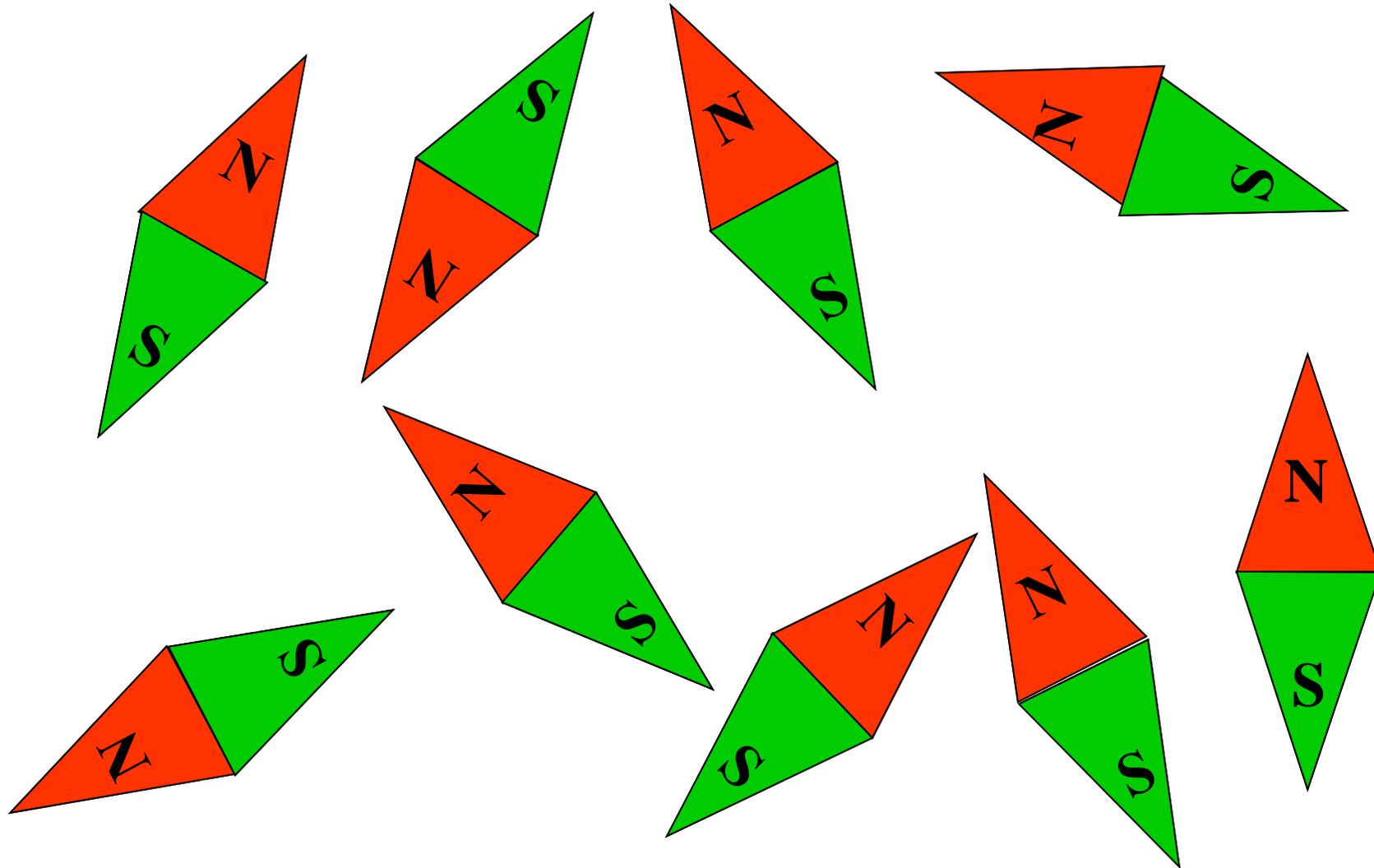
Aufnahme des Sonnenspektrums mit Fraunhofer Linien

Beachte: unterschiedlich starke Absorption innerhalb des Dupletts

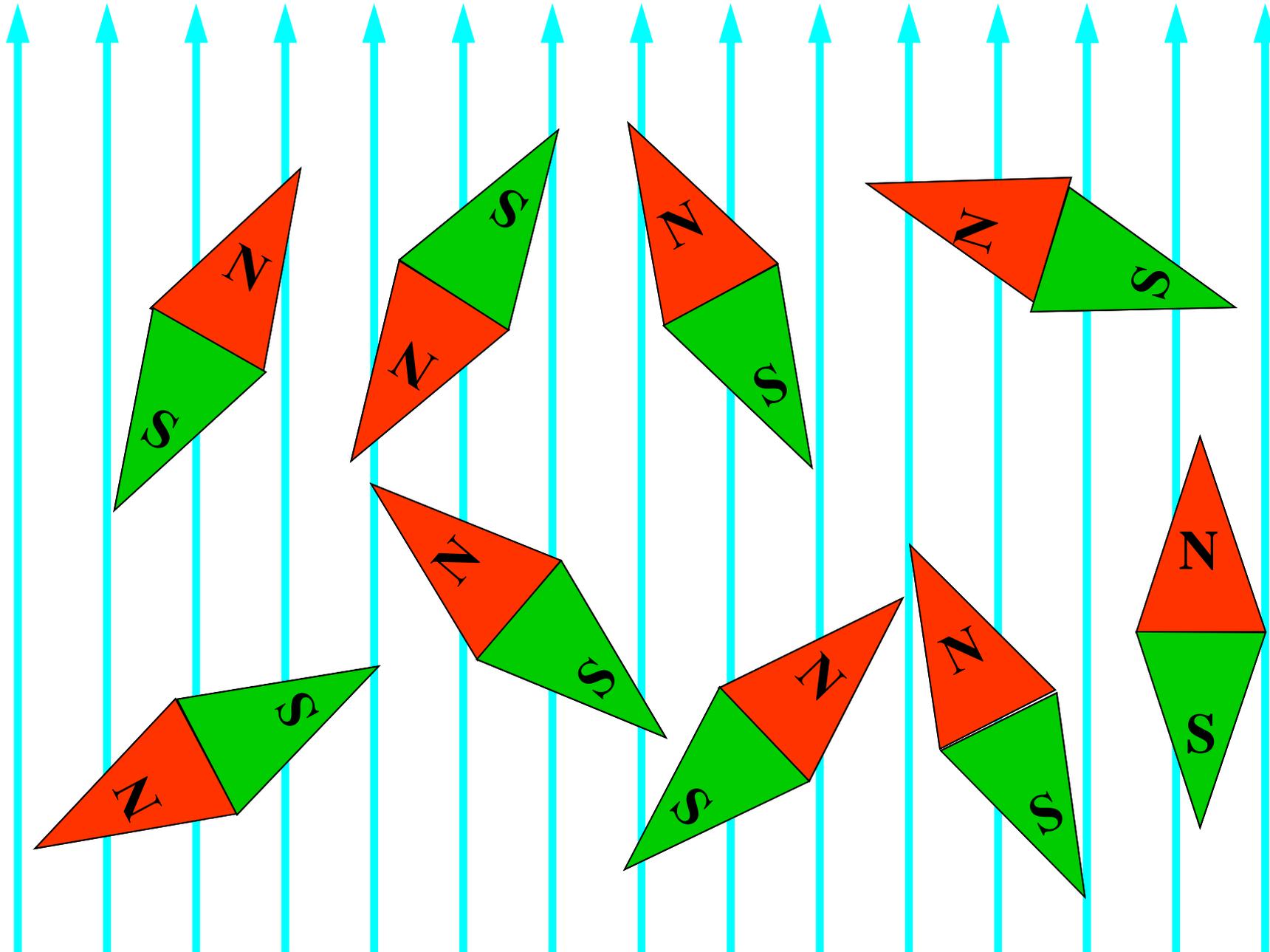
die höherenergetische Linie im Duplett ($3p_{3/2} \rightarrow 3s_{1/2}$) ist intensiver als die weniger energiereiche ($3p_{1/2} \rightarrow 3s_{1/2}$)



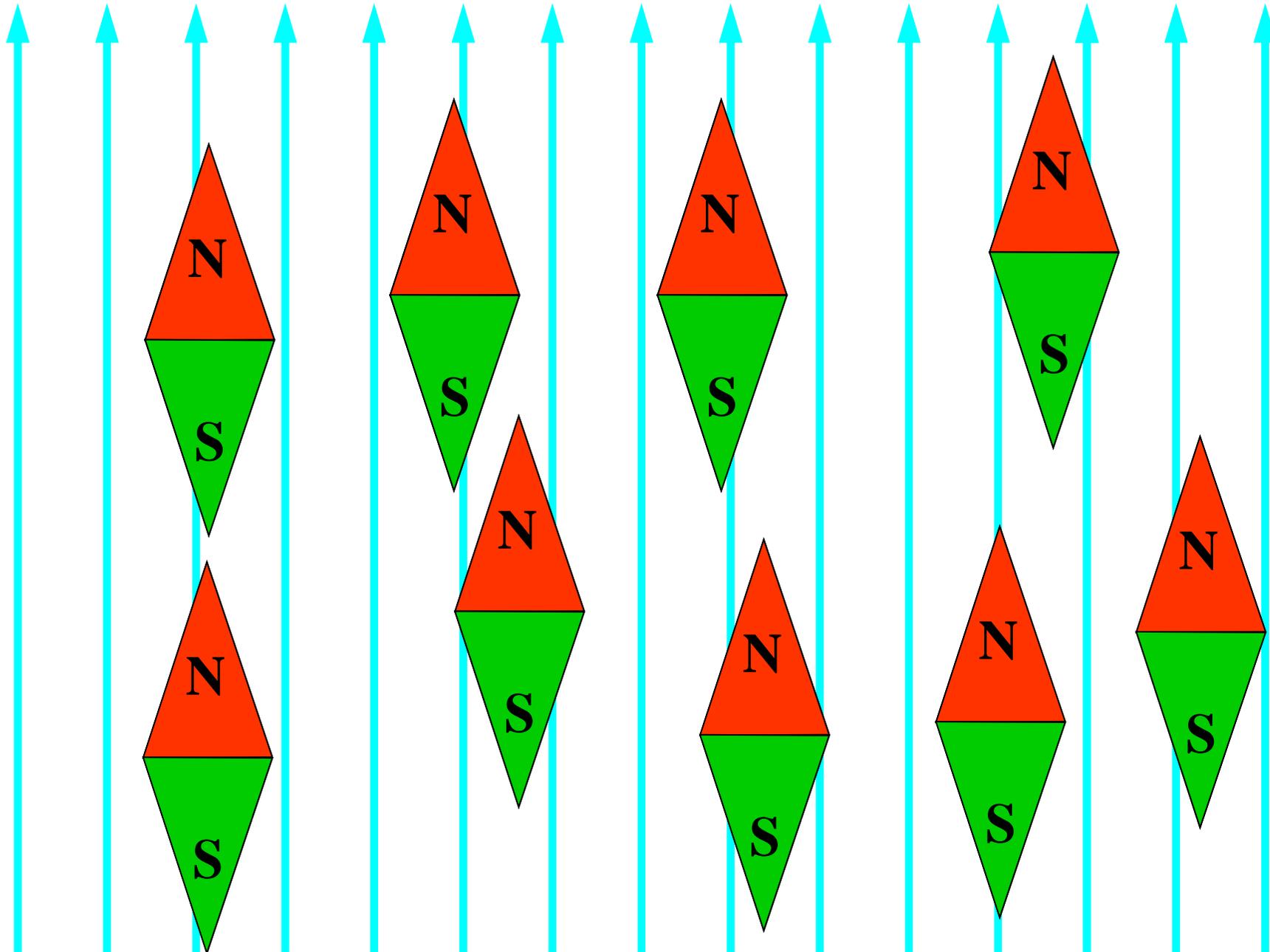
Kompassnadeln im feldfreien Raum



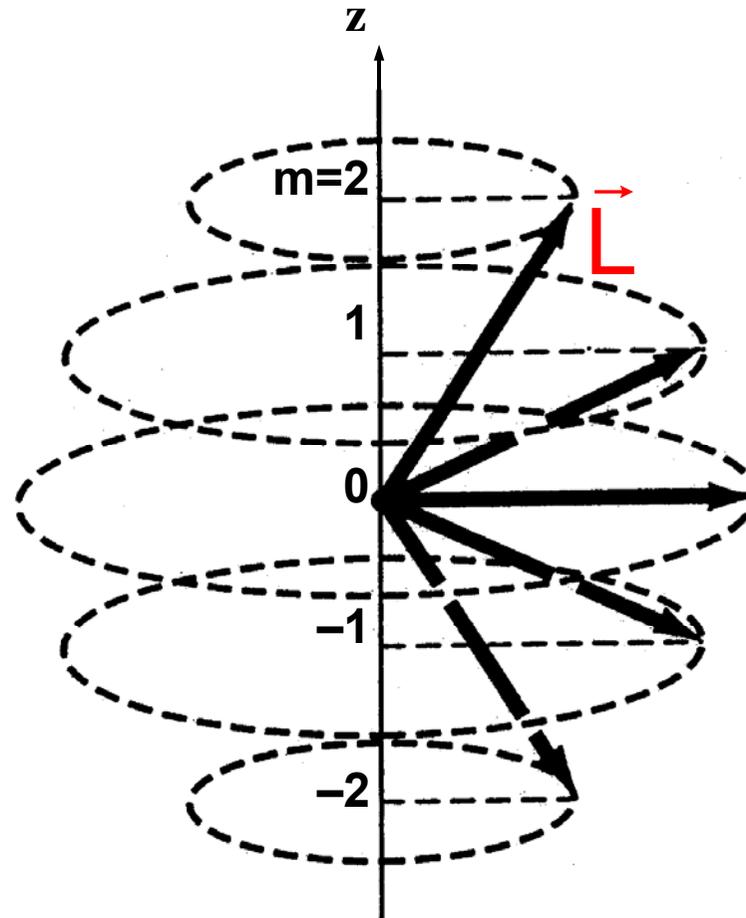
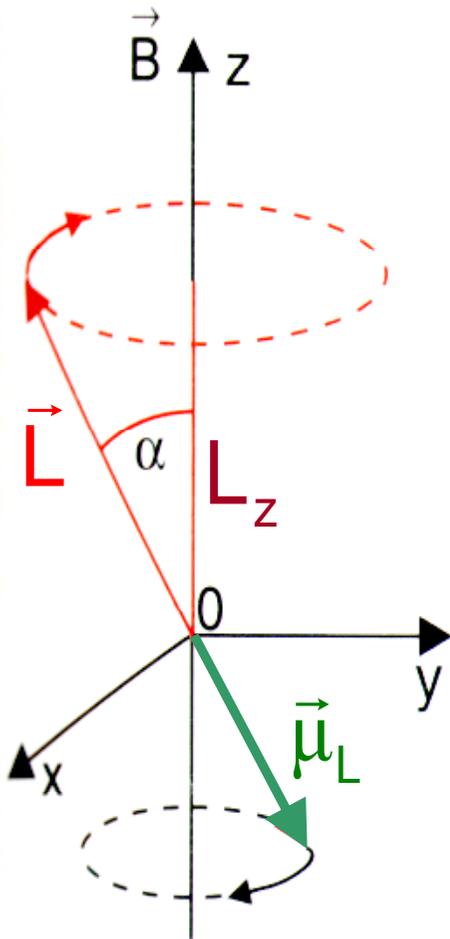
Kompassnadeln: Einschalten eines Magnetfelds



Kompassnadeln im Magnetfeld



Atomare Magnete sind Kreisel



Experimentelle Belege:
Einstein – De Haas Experiment,
Stern – Gerlach Experiment

Magnetismus
durch atomare
Drehimpulse
verursacht

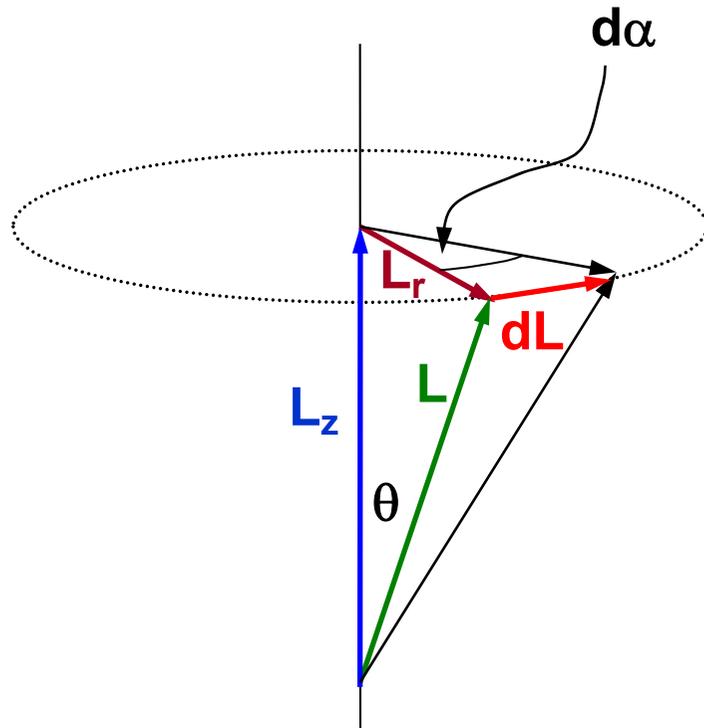
Hier speziell
Bahndrehimpuls

Drehimpulse
unterliegen der
quanten-
mechanischen
Richtungs-
quantelung

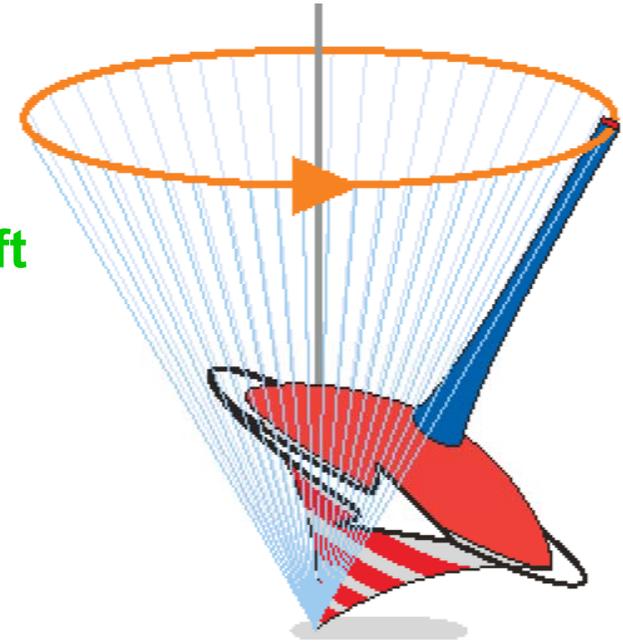
d.h. \vec{L} kann nicht
parallel zur z -
Achse
ausgerichtet sein

Kreiselpräzession

Der **Spielkreisel** vollführt eine **Präzessions-**
bewegung. Er weicht damit der **Gravitationskraft**
aus.



Drehmoment D durch
Gravitationskraft
senkrecht zu L und z



$$\vec{D} = \frac{d\vec{L}}{dt}$$
$$\omega_P = \frac{d\alpha}{dt} = \frac{1}{dt} \frac{dL}{L_r} = \frac{dL}{dt} \frac{1}{L \sin \theta}$$
$$\omega_P = \frac{D}{L \sin \theta}$$

Elektronenspin

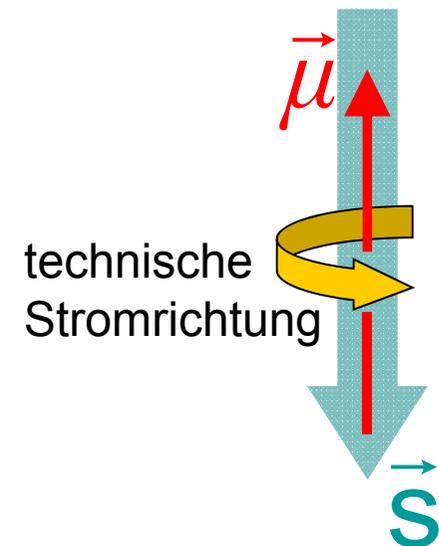
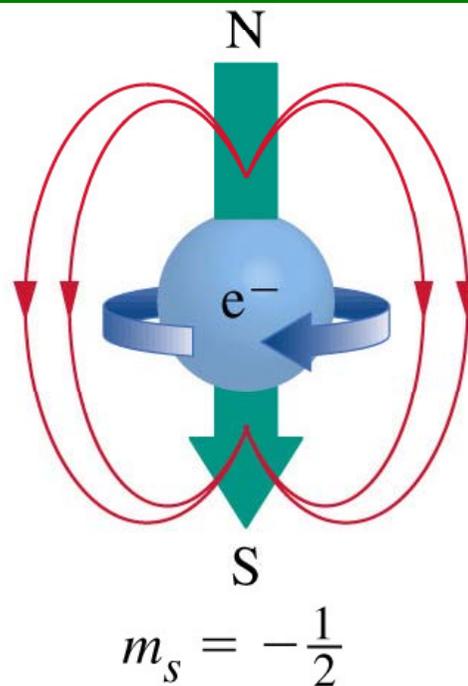
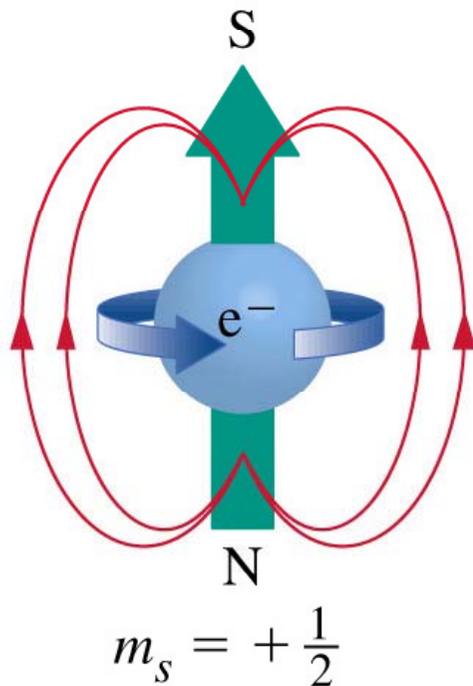
eingeführt 1925 von
zwei jungen
Studenten (23 bzw. 25
Jahre alt), die bei
Ehrenfest studierten:



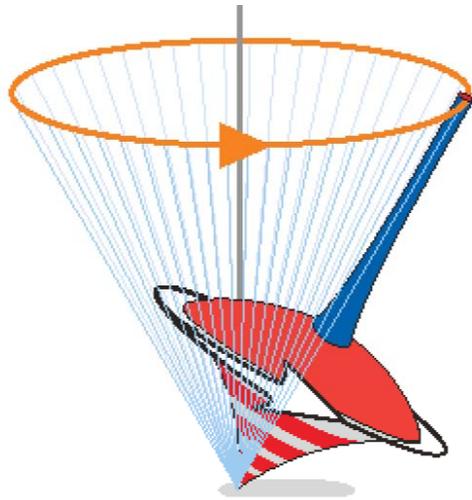
Uhlenbeck 1900-1988



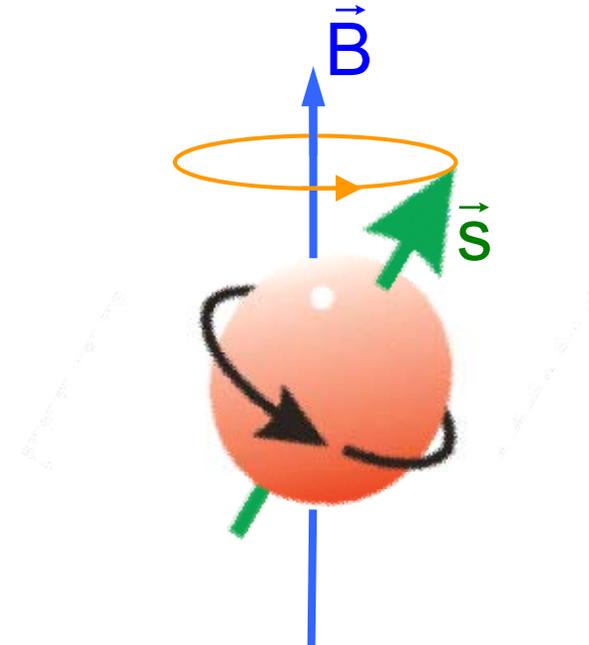
Goudsmit 1902-1976



Elektronen: magnetische Kreisel im Magnetfeld



Der **Spielkreisel** vollführt eine **Präzessions**bewegung, um der **Gravitationskraft** auszuweichen.



Der **Elektronkreisel** vollführt eine **Präzessions**bewegung, um der **Magnetkraft** auszuweichen.

Elektron: Spin und magnetisches Moment

Eigendrehimpuls des
Elektrons:

$$\vec{S}$$

magnetisches Moment:

$$\vec{\mu}_s = -\gamma \vec{S} = -g_s \mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar}$$

messbar sind:

$$S_z, \vec{S}^2, \mu_{s,z}$$

mit Eigenwerten:

$$m_s \hbar, s(s+1)\hbar^2, g_s \mu_B m_s$$

Richtungs-
quantisierung

$$m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$$

wobei:

$$s = \max\{m_s\} = \frac{1}{2}$$

mit $g_s \approx 2$

$$\mu_s = \max\{\mu_{s,z}\} = g_s \mu_B \frac{1}{2} \approx \mu_B$$

Elektronen im Magnetfeld

Energieverschiebungen:

$$E_{\pm} = \pm g_s \mu_B m_s B = \pm \frac{g_s \mu_B}{2} B$$

Energieaufspaltung:

$$\Delta E = E_+ - E_- = g_s \mu_B B$$

Präzessionsfrequenz
analog klass. Kreisel:

$$\omega_P = 2\pi\nu_P = \frac{|\vec{\mu}_s| B}{|\vec{s}|} = \gamma B = \frac{g_s \mu_B B}{\hbar}$$

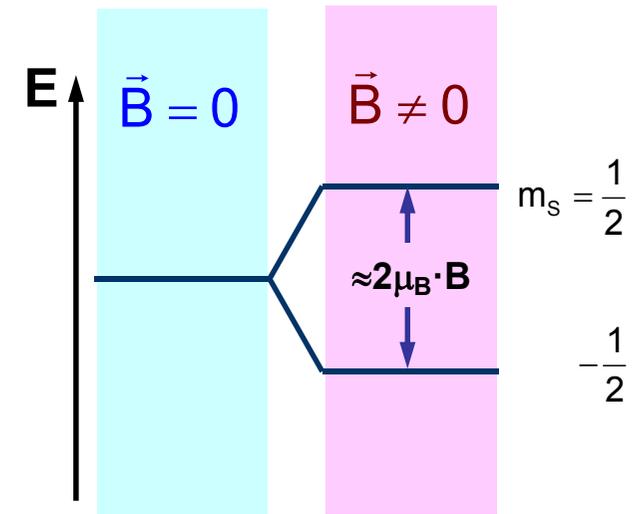
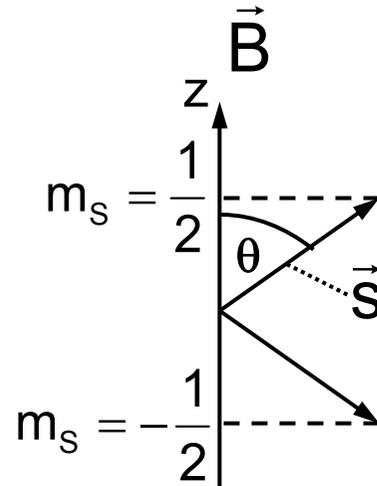
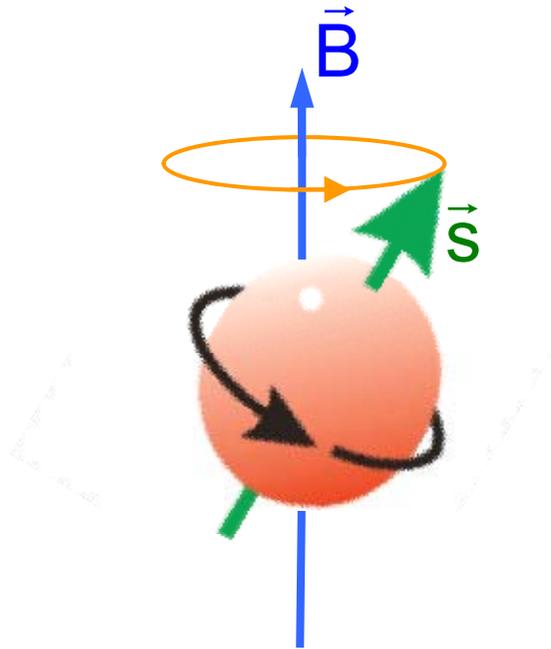
mit (spin-)magn. Moment:

$$\begin{aligned} \vec{\mu}_s &= -g_s \mu_B \frac{\vec{s}}{\hbar} = -\gamma \vec{s} \\ &\Rightarrow |\vec{\mu}_s| = \gamma |\vec{s}| \end{aligned}$$

→ Präzessionsfrequenz
gleich Umklappfrequenz

$$\hbar\omega_P = g_s \mu_B B = \Delta E = \hbar\omega$$

Präzessionsfrequenz der Elektronen im Magnetfeld



Die **Präzessionsfrequenz** in einem Magnetfeld B ist:

$$\nu_P = \frac{\gamma}{2\pi} B = \frac{g_s \mu_B}{2\pi \hbar} B$$

$g_{s,e} = (-)2.002\ 319\ 304\ 3622(15)$ (CODATA 2006)

$m_S = -\frac{1}{2}$ bedeutet:

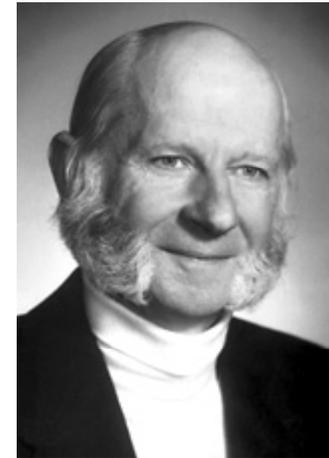
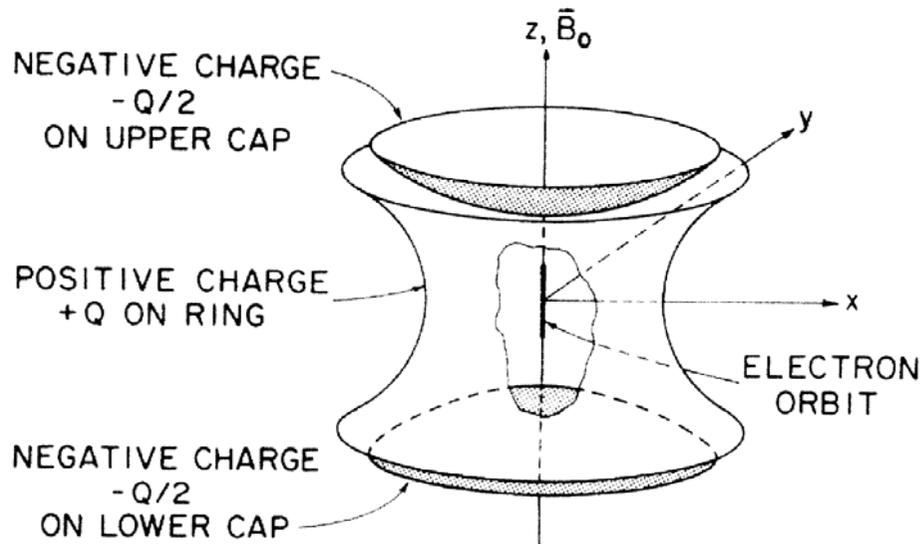
The diagram shows the magnetic field vector \vec{B} pointing upwards. The spin vector \vec{S} points downwards and to the right. The magnetic moment vector $\vec{\mu}_s$ points upwards and to the left, opposite to the direction of \vec{S} .

Energetisch günstig
Bindungsenergie erhöht

Landé-Faktor des Elektrons

$$\vec{\mu}_s = -g_s \mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar} = -\gamma \vec{S} \quad \text{bzw.} \quad \mu_{s,z} = -g_s \mu_B \frac{S_z}{\hbar} = -\gamma S_z$$

Geonium: einzelnes Elektron in einer Falle im Schwerfeld der Erde



Hans G. Dehmelt
Nobelpreis 1989

Induktion von Spin-Flips durch Einstrahlung von Mikrowellen mit der Frequenz des Übergangs [R. S. Van Dyck et al., Phys. Rev. D34, 722 \(1986\)](#)

$$g_s = 2.002\ 319\ 304\ 400\ (80) \quad \Delta g_s / g_s = 4 \times 10^{-11}$$

Landé-Faktor des freien Elektrons (Stand 2009)

$$\mu_s = g_s \mu_B \frac{1}{2}$$

Experiment: D. Hanneke et al., Phys. Rev. Lett. **100**, 120801 (2008)

$$g_s = 2.002\ 319\ 304\ 261\ 46(56) \quad \Delta g_s / g_s = 2.8 \times 10^{-13}$$

Theorie: T. Aoyama et al., Phys. Rev. Lett. **99**, 110406 (2007)

$$g_s = 2.002\ 319\ 304\ 3409(170) \quad \Delta g_s / g_s = 8.5 \times 10^{-12} \text{ (inzwischen genauer)}$$

Quantenelektrodynamik-
Rechnungen:
hier Beiträge der Ordnung
 $(\alpha/\pi)^4$ ($= 2.9 \times 10^{-11}$)

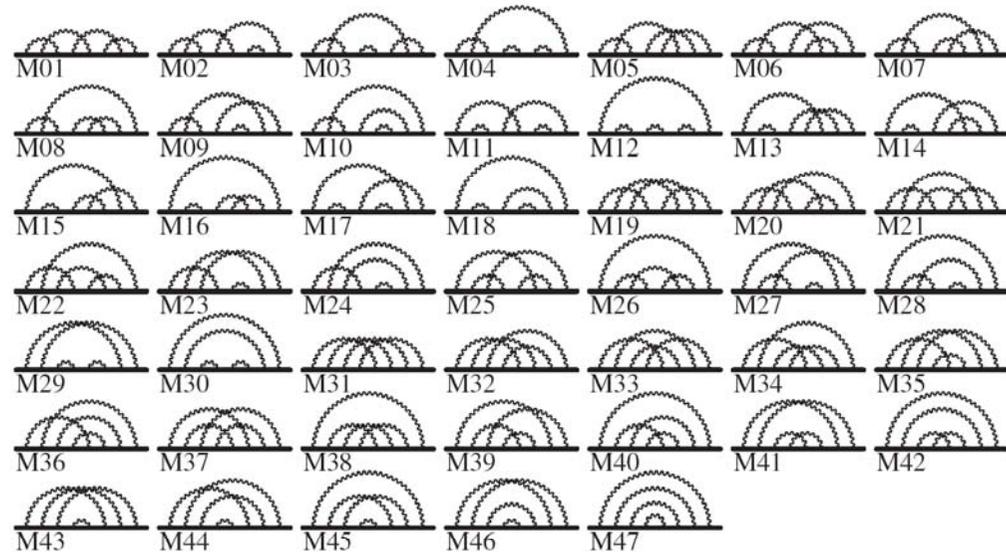


FIG. 1. Eighth-order group V diagrams. 47 self-energy-like diagrams of $M_{01} - M_{47}$ represent 518 vertex diagrams.

Landé-Faktor des gebundenen Elektrons

Experiment: J. Verdú et al., Phys. Rev. Lett. **92**, 093002 (2004)

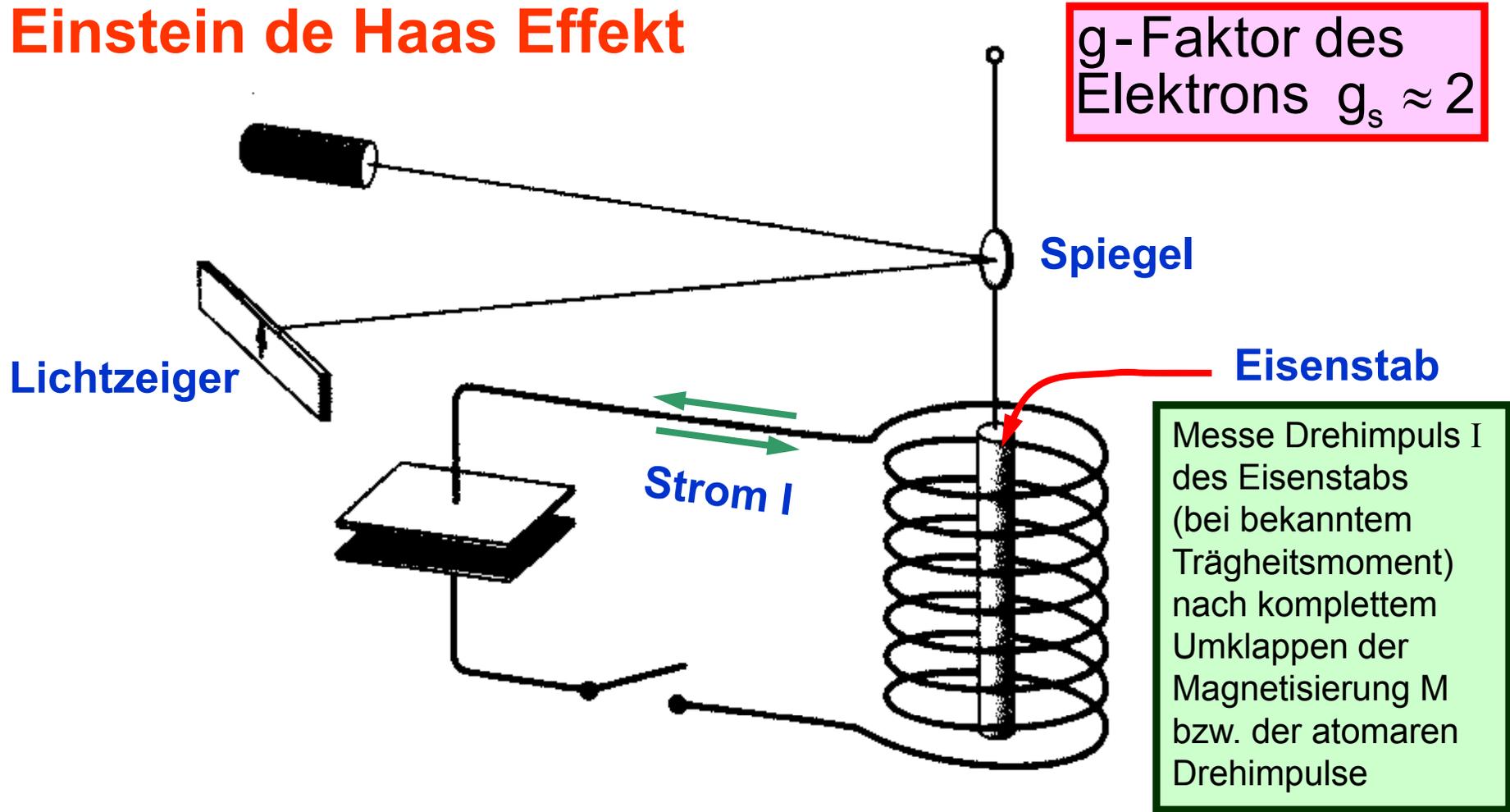
g-Faktor des in $^{16}\text{O}^{7+}$ gebundenen Elektrons

$$g_s = 2.000\ 047\ 025\ 4\ (15)(44)$$

Im Vergleich dazu das freie Elektron:

$$g_s = 2.002\ 319\ 304\ 3617(15)$$

Einstein de Haas Effekt



$$\Delta I = n \cdot 2 \cdot |\vec{I}_z|$$

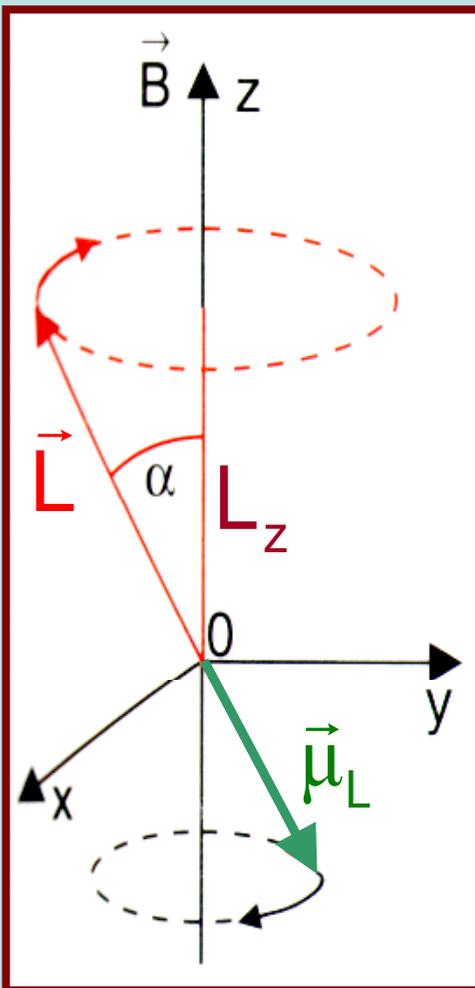
$$\Delta M = n \cdot 2 \cdot |\vec{\mu}_z| = 2n |\gamma_I \vec{I}_z|$$



$$\frac{\Delta M_z}{\Delta I_z} = \frac{|\vec{\mu}_z|}{|\vec{I}_z|} = \gamma_I = \frac{g_I \cdot \mu_B}{\hbar}$$

O. Sterns Vorstellung: Bahnmagnetisches Moment

→ Versuch, die Richtungsquantelung an Ag nachzuweisen



Silberatom:

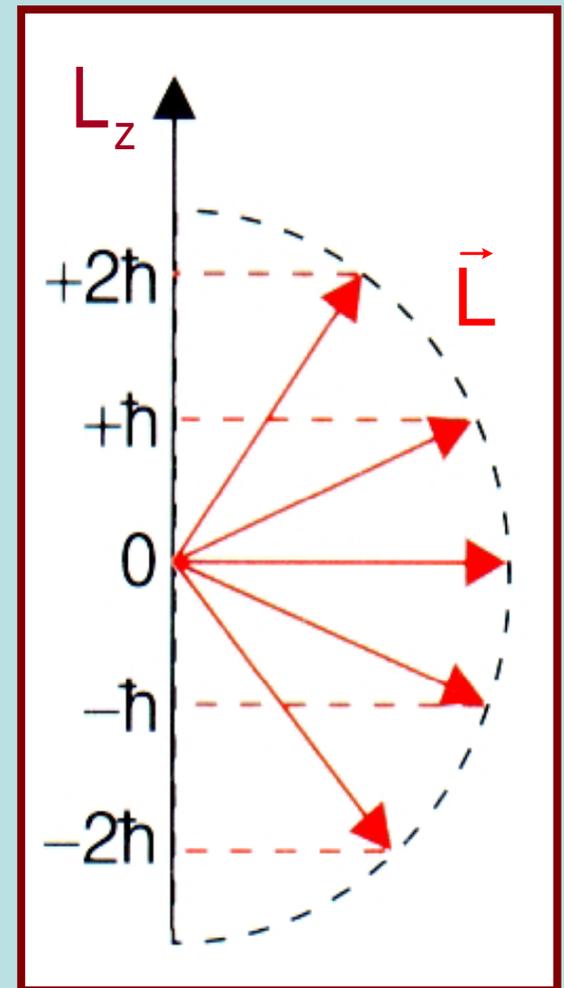
einwertig –
s. Faraday Effekt

Vorstellung war:

Leuchtelektron auf einer
Bohrschen Bahn

Demnach zu überprüfen:
Richtungsquantelung

aber: $\text{Ag} ([\text{Kr}] 4d^{10} 5s)$



Pech für Stern und Gerlach: Leuchtelektron hat Bahndrehimpuls $l = 0$
Glück der Tüchtigen: Leuchtelektron hat Spin $s = 1/2$

Nachweis der Richtungsquantelung

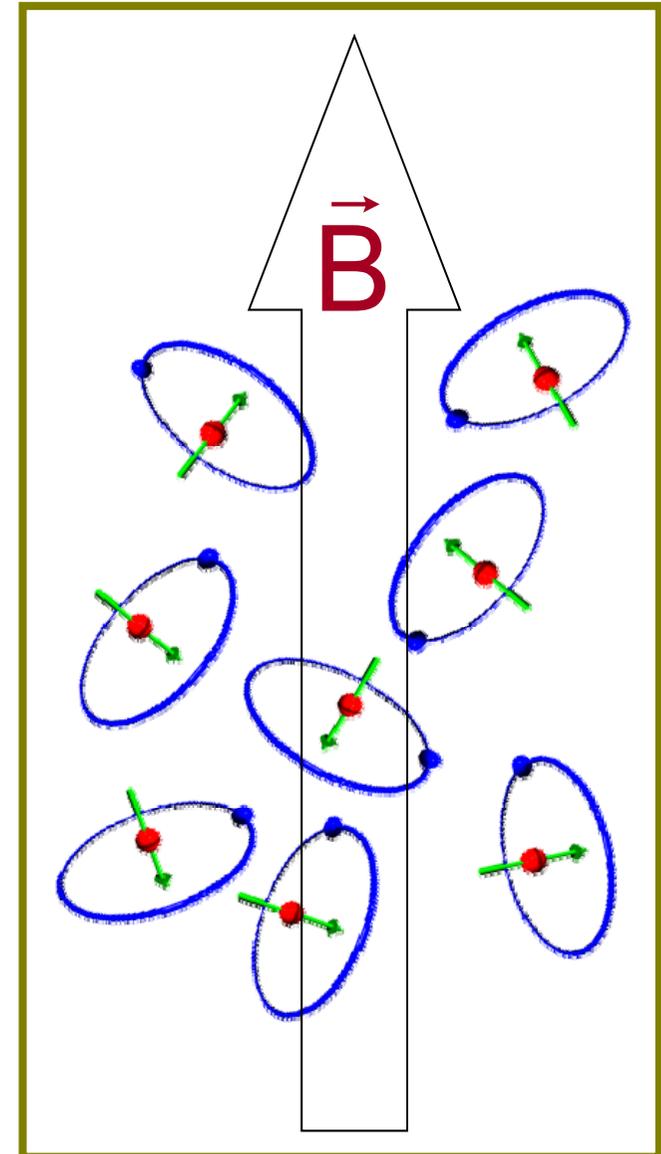


Walther Gerlach

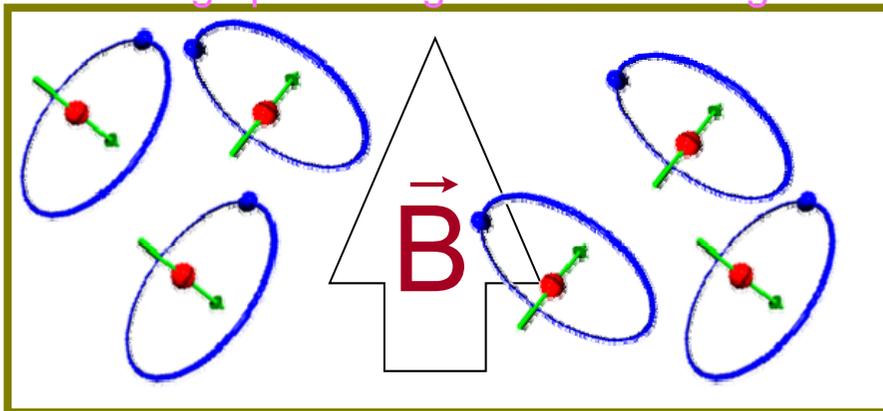


Otto Stern

beliebige Orientierung
der atomaren Magnete?



Richtungsquantelung mit 2 Einstellungen?



?
oder
?

Prinzip des Stern-Gerlach Experiments

Energie eines magnetischen
Dipols im magnetischen Feld:

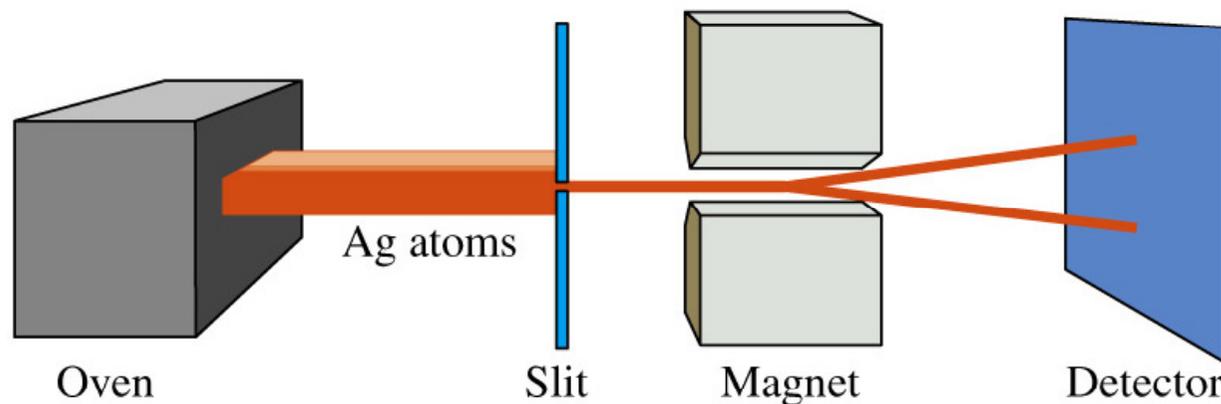
$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Drehmoment auf den Dipol:

$$\vec{D} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$

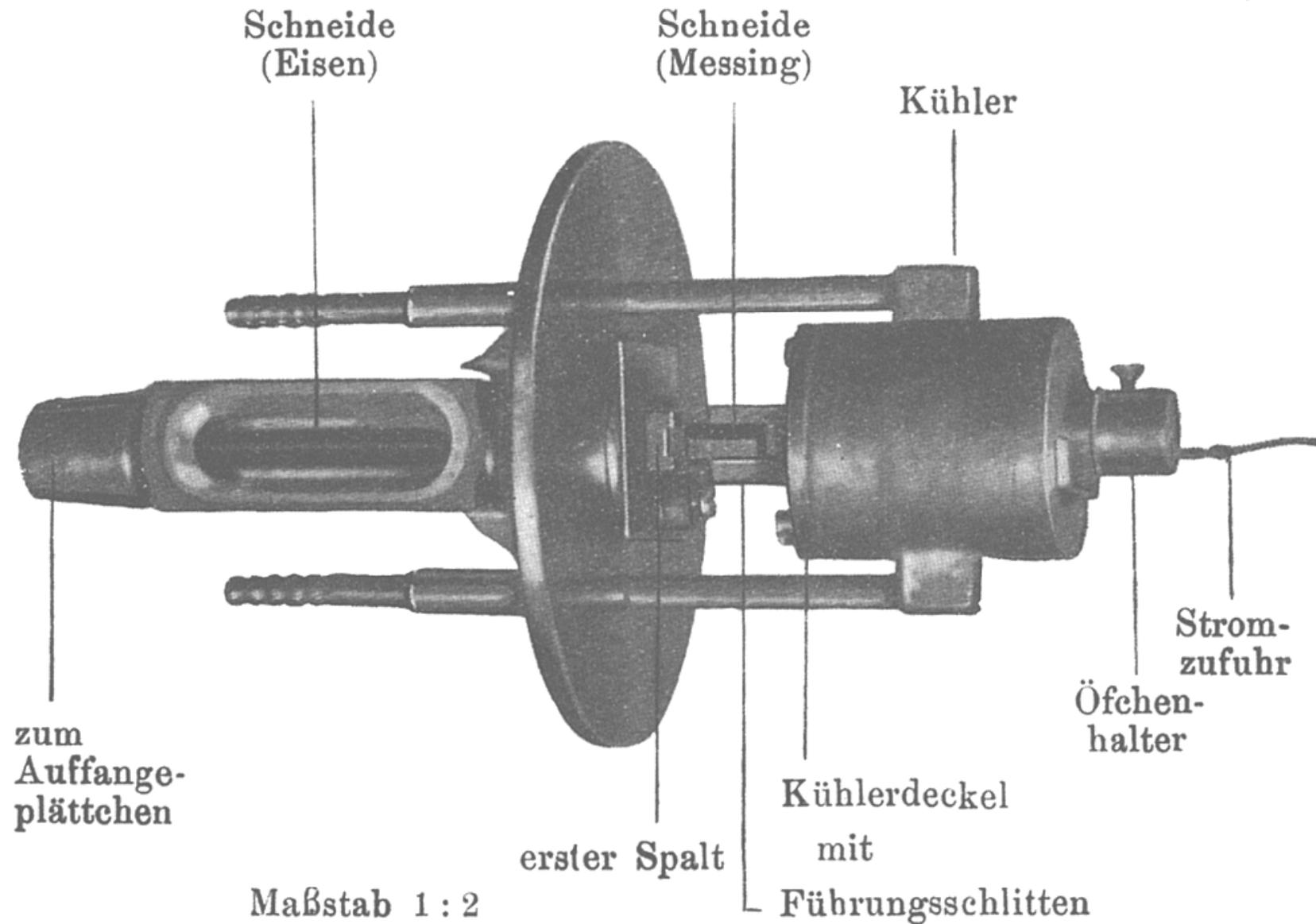
Kraft auf den Dipol im statischen
inhomogenen Magnetfeld:

$$\vec{F} = (\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}) \vec{B}$$



$$\text{Ablenkkraft } F \approx \mu_z \frac{\partial}{\partial z} B_z = \pm \frac{1}{2} g_s \mu_B \frac{\partial}{\partial z} B_z$$

Apparatur zum Nachweis der Richtungsquantelung



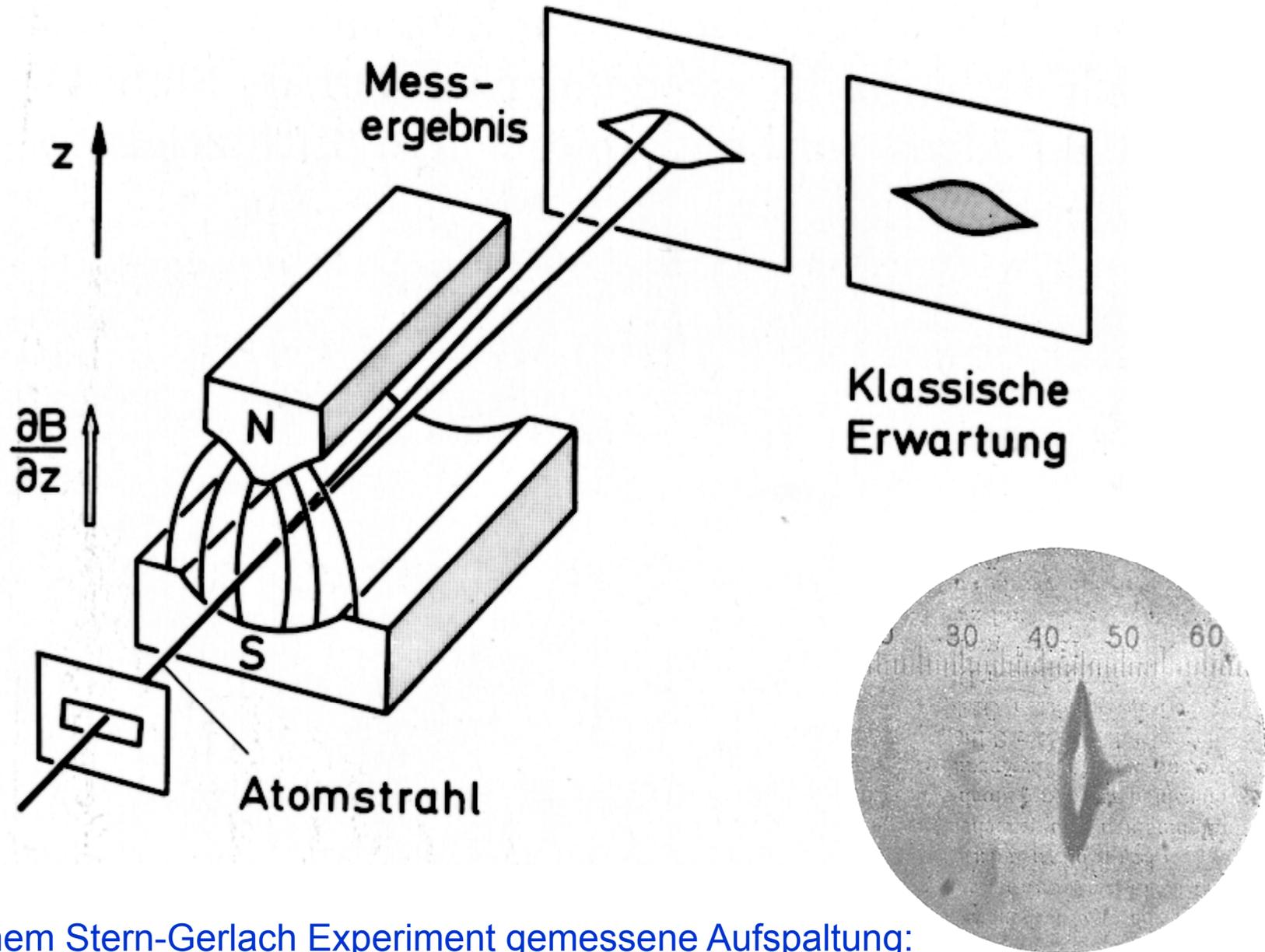
Hauptteil der Apparatur zum Nachweis der Richtungsquantelung, um 1924 (Nr.57)

Professor Otto Stern beim Experimentieren



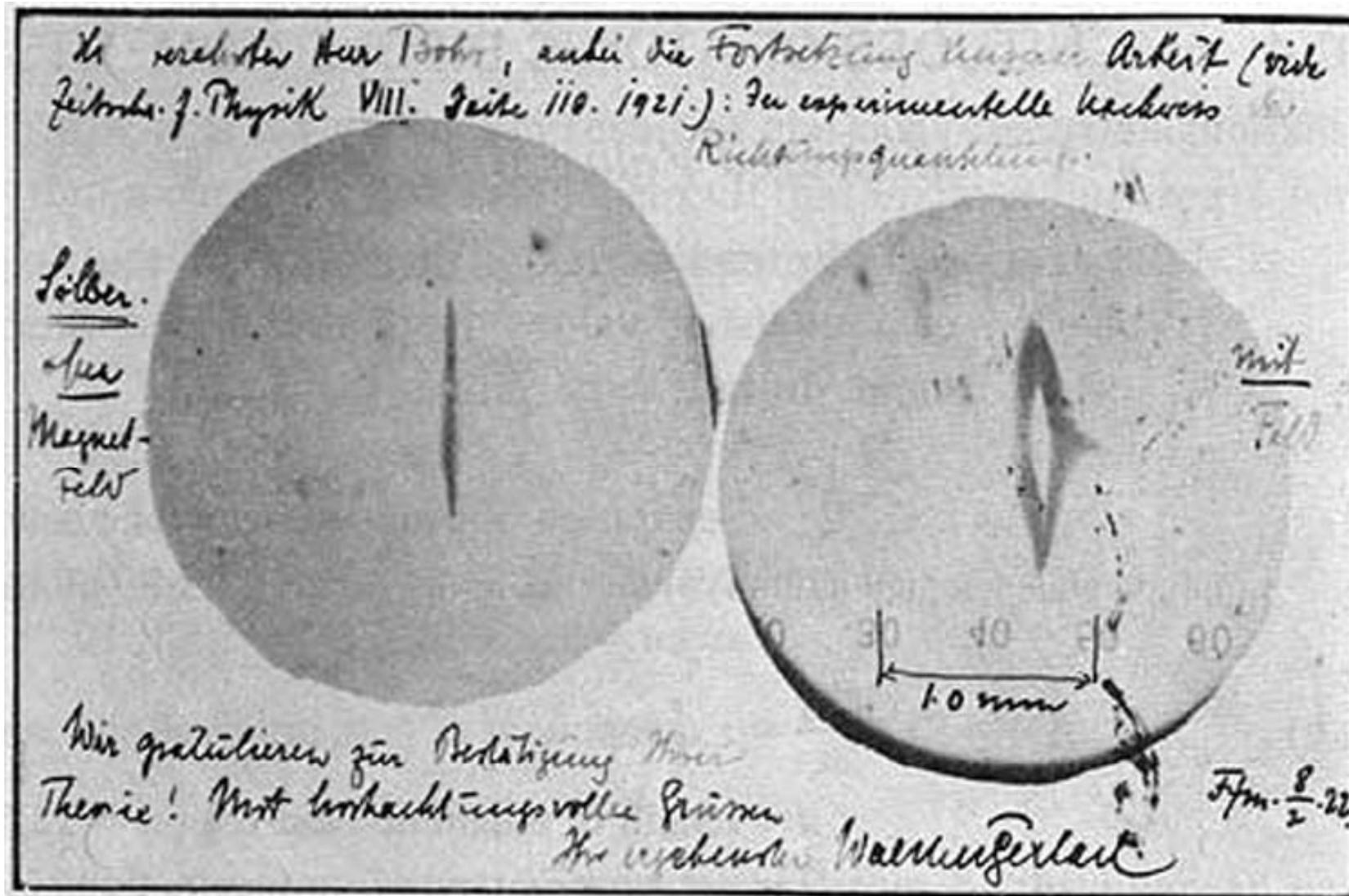
Nobelpreis 1943 „for his contribution to the development of the molecular ray method and his discovery of the magnetic moment of the proton“

Nachweis der Richtungsquantelung: Februar 1922



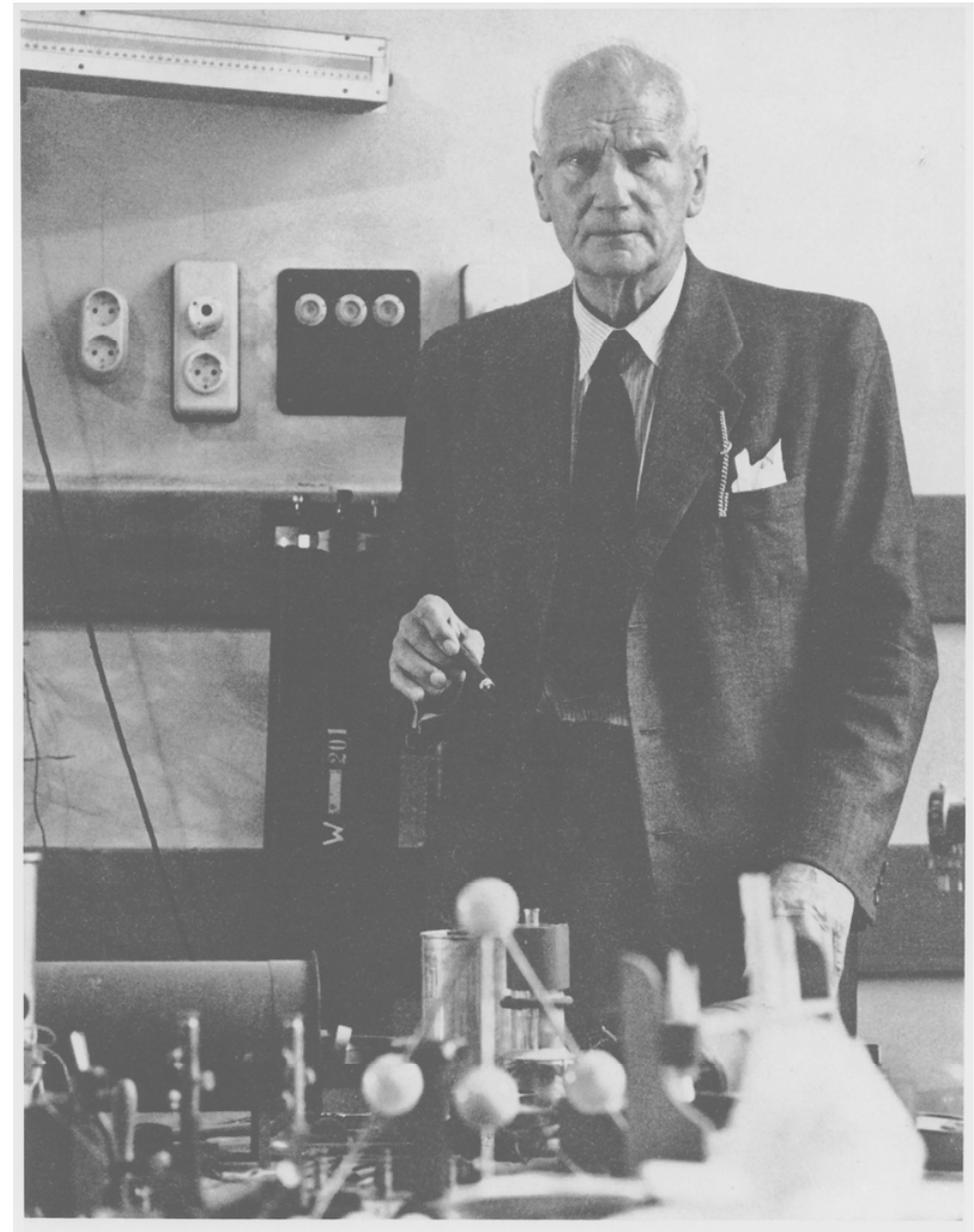
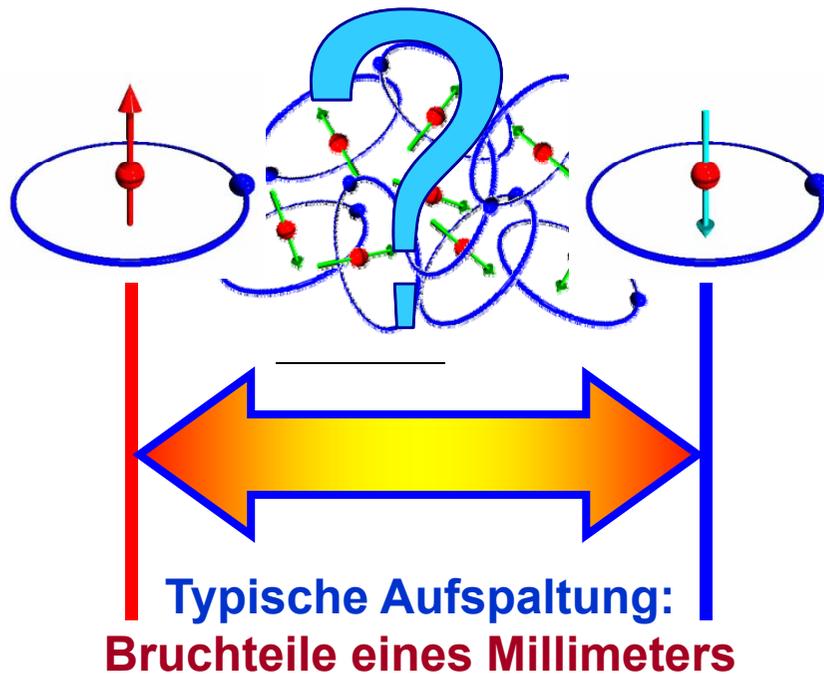
In einem Stern-Gerlach Experiment gemessene Aufspaltung:

Karte Gerlachs an Bohr: Februar 1922



Gerlach's postcard, dated 8 February 1922, to Niels Bohr. It shows a photograph of the beam splitting, with the message, in translation: "Attached [is] the experimental proof of directional quantization. We congratulate [you] on the confirmation of your theory." (Physics Today December 2003)

Schwierige Experimente!!!



"Lichtstrahlen sind zu brechen, Atomstrahlen sind zum K...."

Inschrift eines Aschenbechers, den Gerlach Stern zum Abschied aus Frankfurt schenkte

Drehimpulseigenschaften in der Quantenmechanik

quantenmechanischer Drehimpuls \vec{I}

Gleichzeitig messbar: \vec{I}^2 und \vec{I}_z

Eigenwerte:

$$\vec{I}_z \rightarrow m\hbar$$

$$\vec{I}^2 \rightarrow I(I+1)\hbar^2$$

mit der

Orientierungsquantenzahl

$$m = -I, -I+1, \dots, I-1, I$$

und der

Drehimpulsquantenzahl

$$I = \max\{m\}$$

Magnetisches Moment resultierend aus Drehimpuls

Magnetisches Moment $\vec{\mu}_I = -g_I \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{I}$

messbar: \vec{I}_z und damit $\vec{\mu}_{I,z} = -g_I \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{I}_z$

Messwerte:

$$\begin{array}{l} \vec{I}_z \rightarrow m\hbar \\ \vec{\mu}_{I,z} \rightarrow -g_I \frac{\mu_B}{\hbar} m\hbar = -g_I \mu_B m \end{array}$$

mit der

Orientierungsquantenzahl

$$m = -I, -I+1, \dots, I-1, I$$

und dem (messbaren)
magnetischen Moment

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu_I = \max \{ -g_I \mu_B m \} \\ \mu_I = g_I \mu_B I \end{array} \right.$$

Drehimpulse

Seien \vec{I}_1 und \vec{I}_2 quantenmechanische Drehimpulse

Gleichzeitig messbar: \vec{I}_1^2 und $\vec{I}_{1,z}$ bzw. \vec{I}_2^2 und $\vec{I}_{2,z}$

Eigenwerte:

$$I_1(I_1 + 1)\hbar^2 \quad \text{und} \quad m_1\hbar \quad ,$$

$$m_1 = -I_1, -I_1 + 1, \dots, I_1 - 1, I_1$$

$$I_1 = \max\{m_1\}$$

bzw.

$$I_2(I_2 + 1)\hbar^2 \quad \text{und} \quad m_2\hbar$$

$$m_2 = -I_2, -I_2 + 1, \dots, I_2 - 1, I_2$$

$$I_2 = \max\{m_2\}$$

Quantenmechanische Addition von Drehimpulsen

Sei $\vec{I} = \vec{I}_1 + \vec{I}_2$

$$\vec{I}_z \rightarrow m\hbar$$

$$\vec{I}^2 \rightarrow I(I+1)\hbar^2$$

$$m = -I, -I+1, \dots, I-1, I$$

$$I = \max\{m\}$$

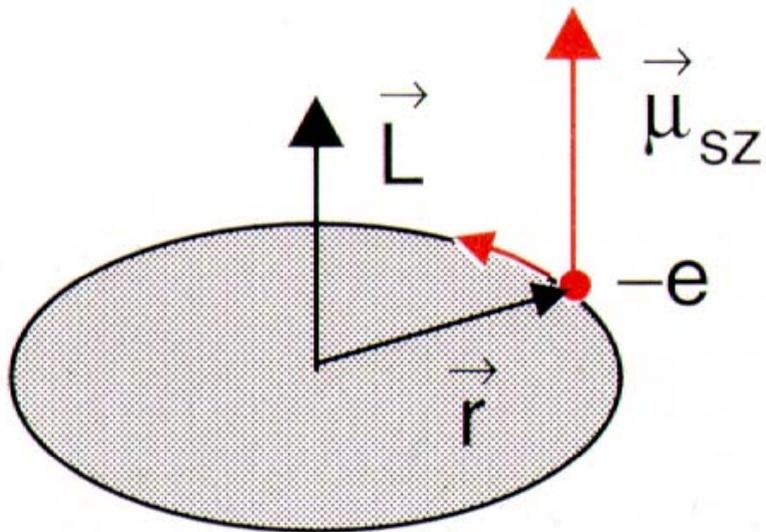
Bedingung:

$$|I_1 - I_2| \leq I \leq I_1 + I_2$$

$$I = |I_1 - I_2|, |I_1 - I_2| + 1, \dots, I_1 + I_2$$

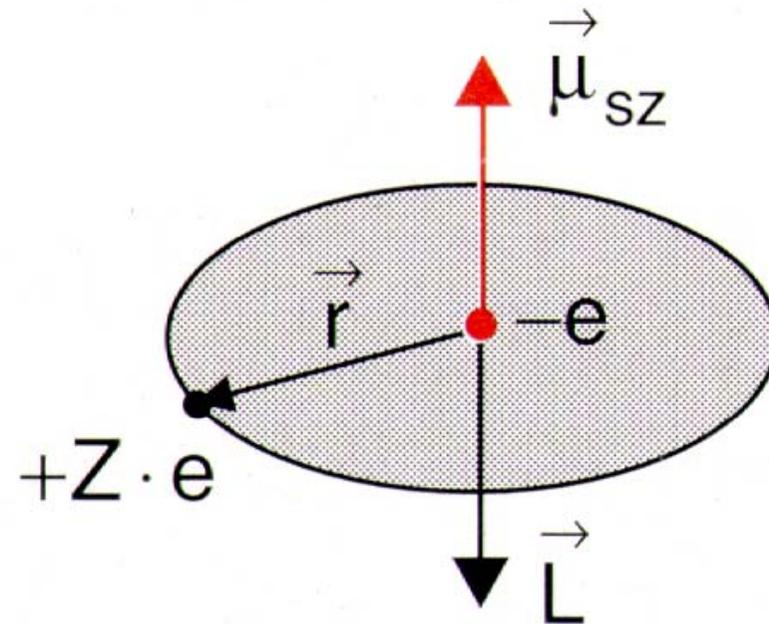
Spin-Bahn Wechselwirkung

Elektron auf Bahn
mit Drehimpuls L
→ Magnetfeld B_L



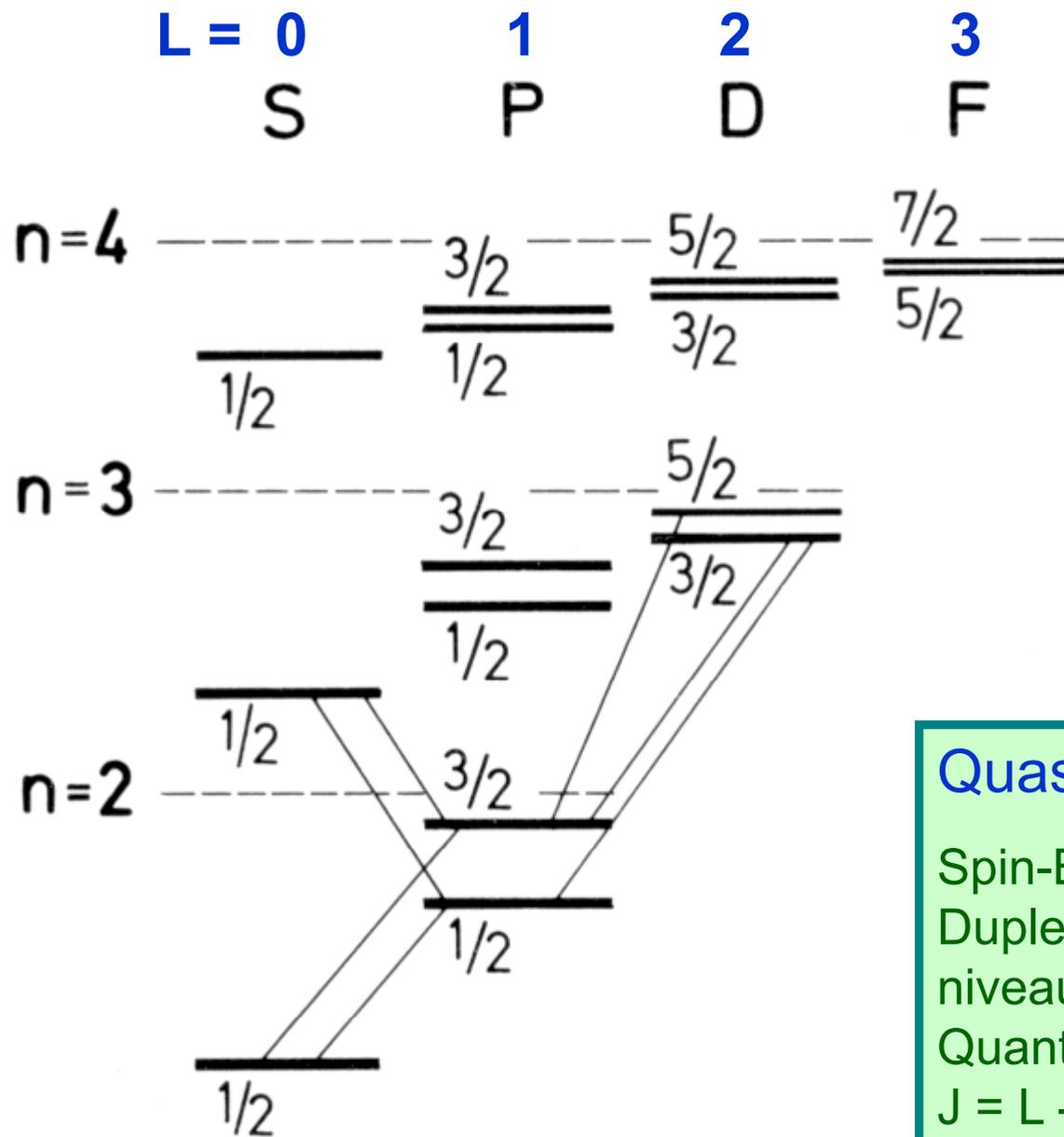
Spin des Elektrons
→ magnetisches
Moment μ_s

Situation im
Ruhsystem
des Elektrons:



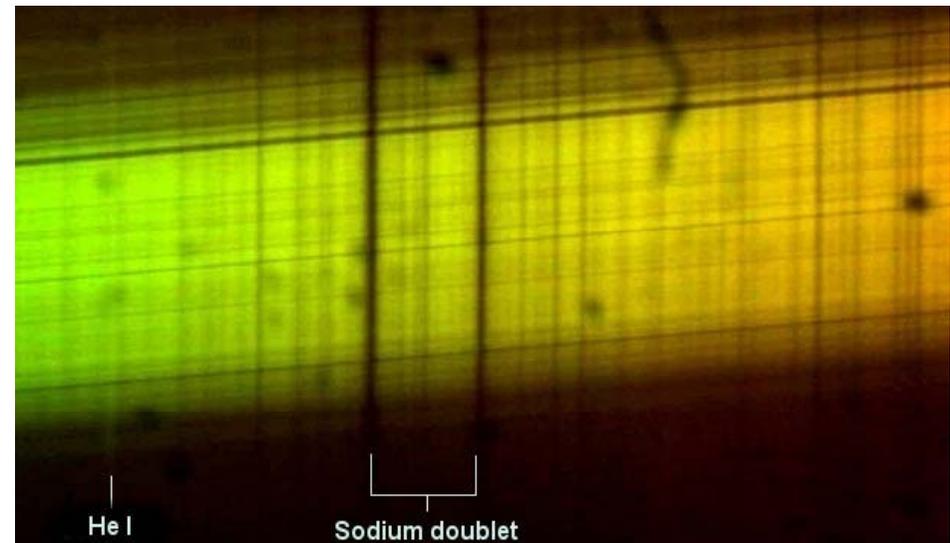
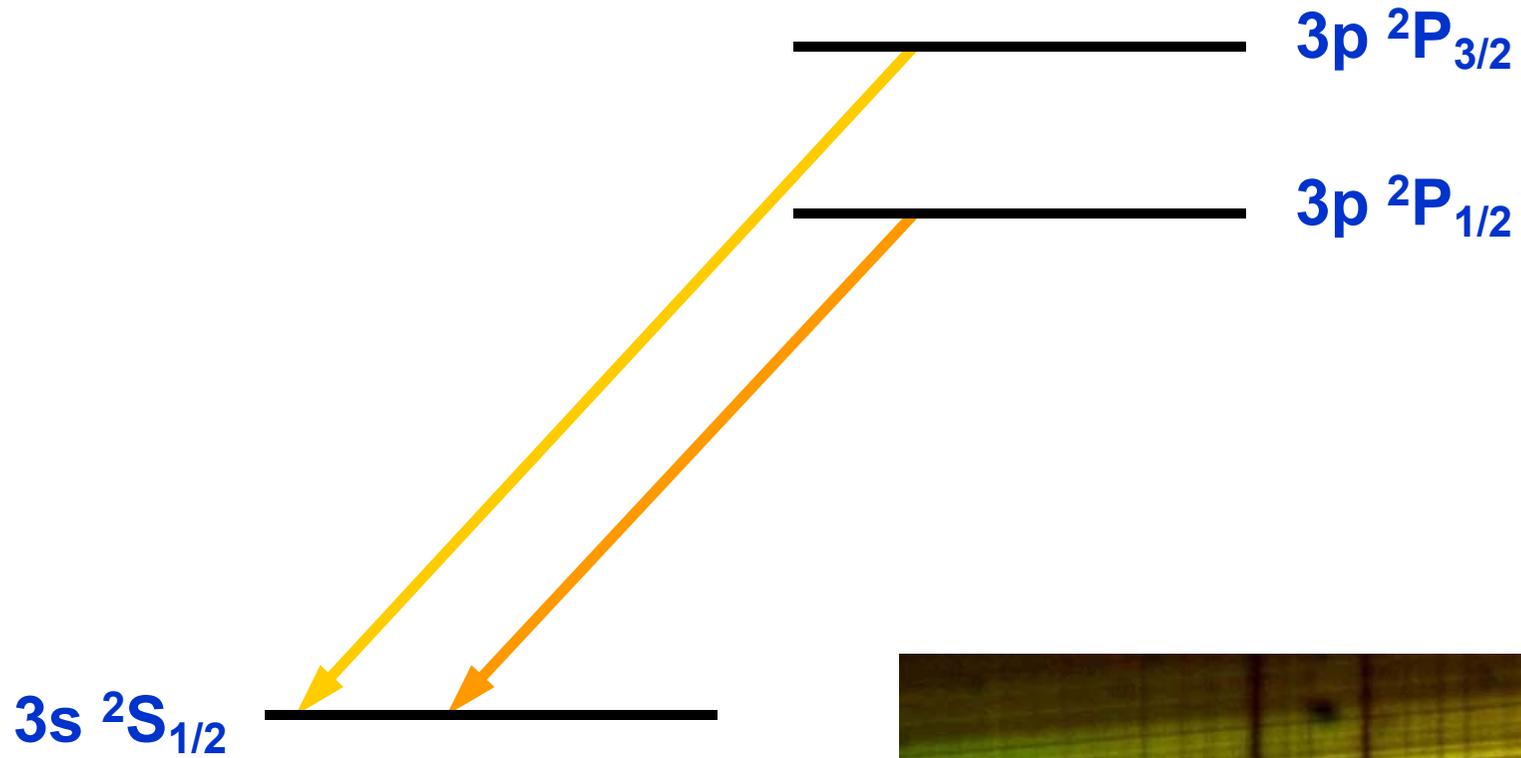
$$V_{ls} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_l \propto \vec{l} \cdot \vec{s}$$

Termschema des Lithium Atoms mit Feinstruktur

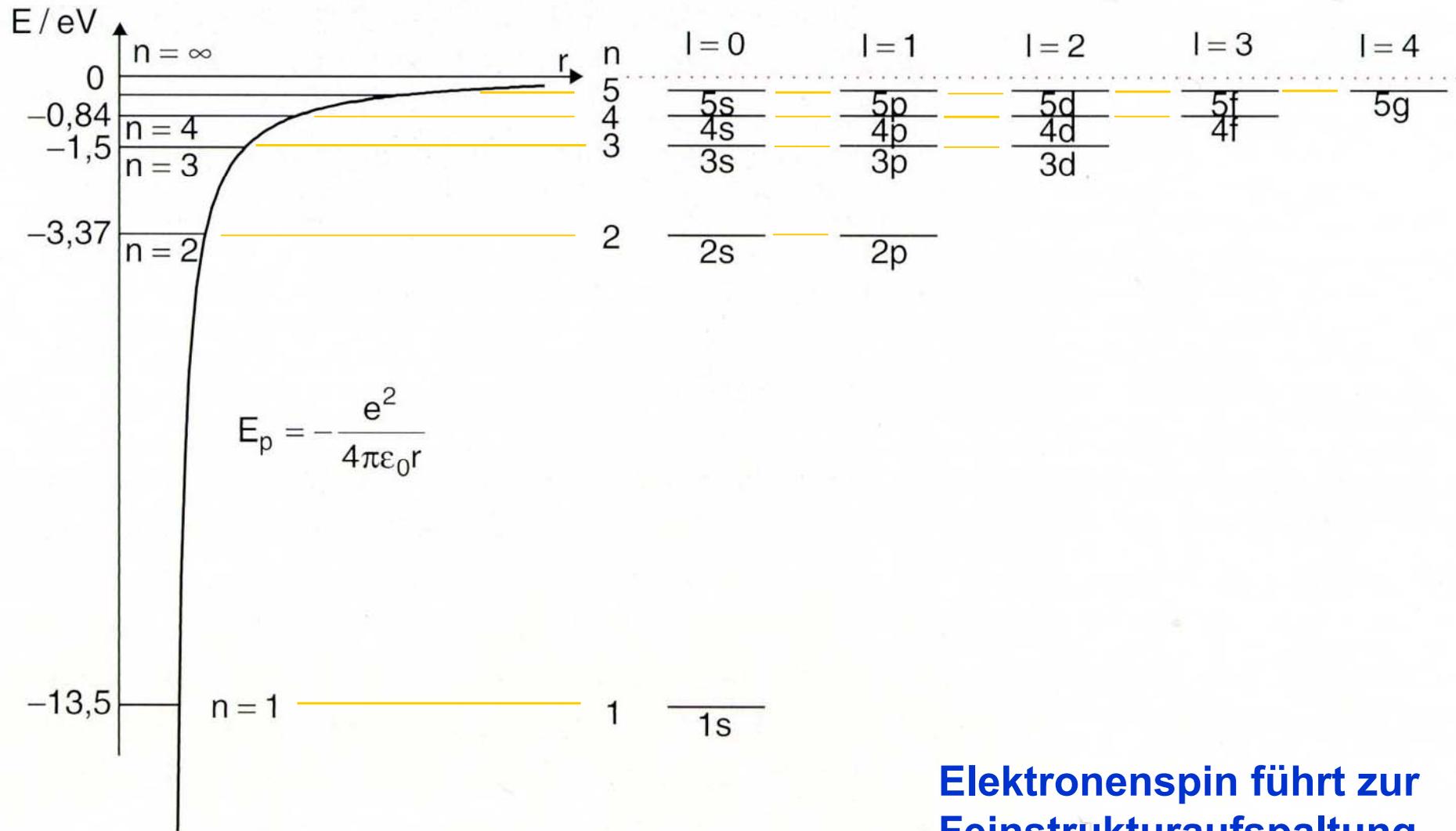


Quasi-Ein-Elektron System
 Spin-Bahn Kopplung führt zur Duplettstruktur von Energieniveaus mit Gesamtdrehimpuls-Quantenzahlen $J = L + 1/2$ und $J = L - 1/2$

Duplettstruktur der Natrium D Linie



Termschema des H-Atoms (Bohr – Schrödinger, Bahndrehimpulsentartung, maßstabsgetreue Energieskala)



Elektronenspin führt zur Feinstrukturaufspaltung

Beschreibung des H-Atoms, bzw. H-ähnlicher Ionen



Johann Jakob Balmer
(1825-1898)



Niels Bohr (1885-1962)



Erwin Schrödinger
(1887-1961)

$$E_n = -\frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \right)^2 m_e \frac{m_K}{m_e + m_K} \frac{Z^2}{n^2} = -R_\infty hc \frac{m_K}{m_e + m_K} \frac{Z^2}{n^2}$$

$$R_\infty hc = 13.605\,691\,93(34) \text{ eV}$$

CODATA 2006

Beiträge zur Feinstrukturaufspaltung

Kopplung der magnetischen Momente von Bahndrehimpuls und Spin:

$$V_{l,s} = \frac{Ze^2\mu_0}{8\pi m^2 r^3} \vec{s} \cdot \vec{l} = \frac{a}{\hbar^2} \vec{s} \cdot \vec{l}$$

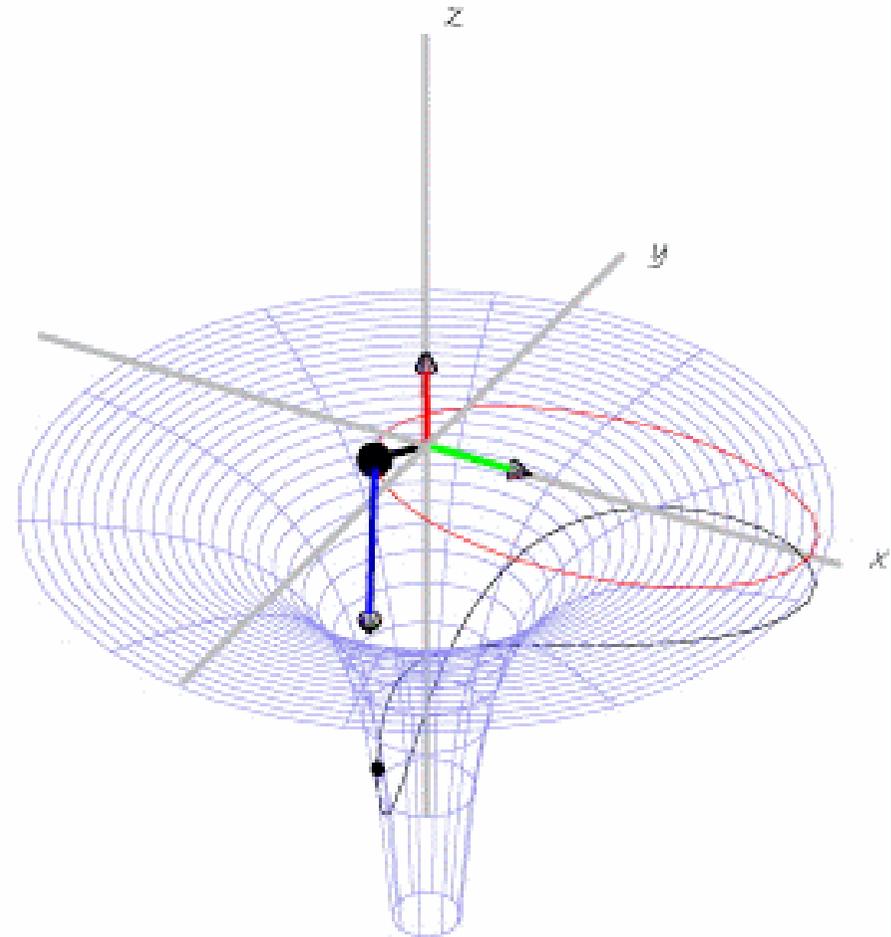
→ Energieaufspaltung gemäß:

$$E_{l,s} = \langle V_{l,s} \rangle = \frac{\langle a \rangle}{\hbar^2} \langle \vec{s} \cdot \vec{l} \rangle$$

$$\langle a \rangle = -E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{n \cdot l \cdot (l + 1/2) \cdot (l + 1)}$$

$$\frac{\langle \vec{s} \cdot \vec{l} \rangle}{\hbar^2} = \frac{1}{2} [j(j + 1) - l(l + 1) - s(s + 1)]$$

Relativistische Effekte auf die Bahnbewegung des Elektrons (s. Sommerfeld)



Beiträge zur Feinstrukturaufspaltung im H-Atom

Kopplung der magnetischen Momente von Bahndrehimpuls und Spin des Elektrons:

→ **Energieverschiebungen:**

für $j = l + 1/2$

$$E_{l,s} = E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{2 \cdot n \cdot (l + 1/2) \cdot (l + 1)}$$

für $j = l - 1/2$

$$E_{l,s} = -E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{2 \cdot n \cdot l \cdot (l + 1/2)}$$

Relativistische Effekte auf die Bahnbewegung des Elektrons

Gesamtenergie mit

Sommerfeldscher Korrektur

mit der Nebenquantenzahl $k=0,1,2,\dots$

$$E_{n,k} = E_n \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{k} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right]$$

(relativistischer) Darwin-Korrektur

$$E_{n,l} = E_n \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{l + 1/2} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right]$$

Theorie zur Feinstrukturaufspaltung im H-Atom



Arnold Sommerfeld
(1868-1951)

**Relativistik der
für die
Elektronen in
einem Atom
angenommenen
Ellipsenbahnen**



Llewellyn Hilleth Thomas
(1903-1992)

**Thomas-
Präzession des
Elektrons unter
Einfluss der
Spin-Bahn
Wechselwirkung**



Paul Adrien Maurice
Dirac (1902-1984)

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial t} = [c\vec{\alpha} \cdot (-i\hbar\nabla) + \beta mc^2] \psi(x)$$

**Relativistische Theorie zum
Spin des Elektrons und der
resultierenden Feinstruktur
atomarer Niveaus**

Diracs Behandlung eines freien Elektrons

Relativistische Gesamtenergie $E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$ soll in $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = E \Psi$

eingesetzt werden. Mit dem Ausdrücken von E in der Form $E = \hat{\alpha} \vec{p}c + \hat{\beta} m_0 c^2$

wird der Wurzelausdruck vermieden.

Mit der Bedingung $p^2c^2 + m_0^2c^4 = E^2 = [\hat{\alpha} \vec{p}c + \hat{\beta} m_0 c^2]^2$ wird die Wahl von $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$ eingeschränkt.

$$\hat{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix}, \quad \alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Bis auf den Faktor $\frac{1}{2}\hbar$ sind

dies die Paulischen Spin-Matrizen

$$\hat{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Dirac Gleichung

Ausgangspunkt ist die Schrödinger-Wellengleichung $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi$ mit dem Energieoperator H . Die relativistische Energie eines freien Elektrons wird nach Dirac in der Form $H = \hat{\alpha} \vec{p}c + \hat{\beta} m_0 c^2$ dargestellt.

Bringt man ein Elektron in ein Potenzial V , so ist der Ausdruck für die Gesamt-Energie um die potentielle Energie zu erweitern. Dementsprechend lautet die Dirac-Gleichung für ein Elektron im Potenzial V :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \{ \hat{\alpha} \vec{p}c + \hat{\beta} m_0 c^2 + V(\vec{r}) \} \Psi$$

Dabei ist Ψ ein vierkomponentiger Vektor ($\hat{\beta}$ ist eine 4x4 Matrix).

$$\hat{\alpha} \vec{p} = \alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z =$$

$$= -i\hbar \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial y} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial z} \right\}$$

Feinstruktur des Wasserstoffatoms: Dirac

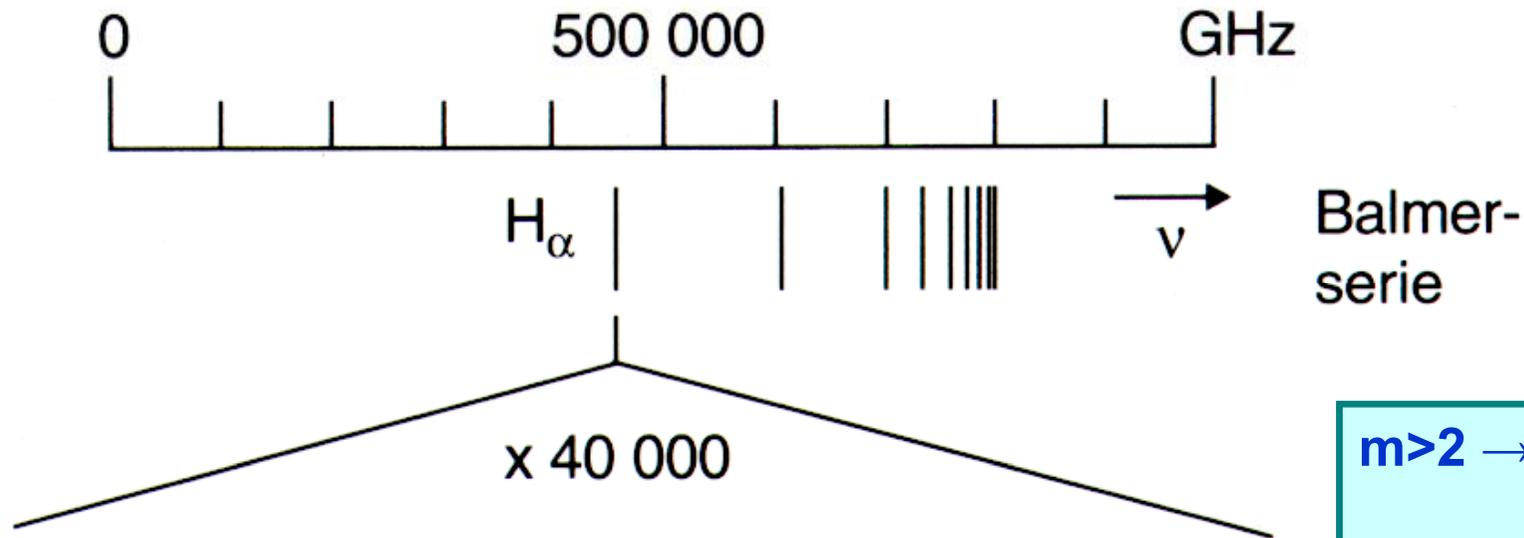
Relativistische Formulierung ($E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$) und Linearisierung ($c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m_0c^2$) des Hamiltonoperators.

Lösungen mit positiven und negativen Energien (Antiteilchen, Dirac See).

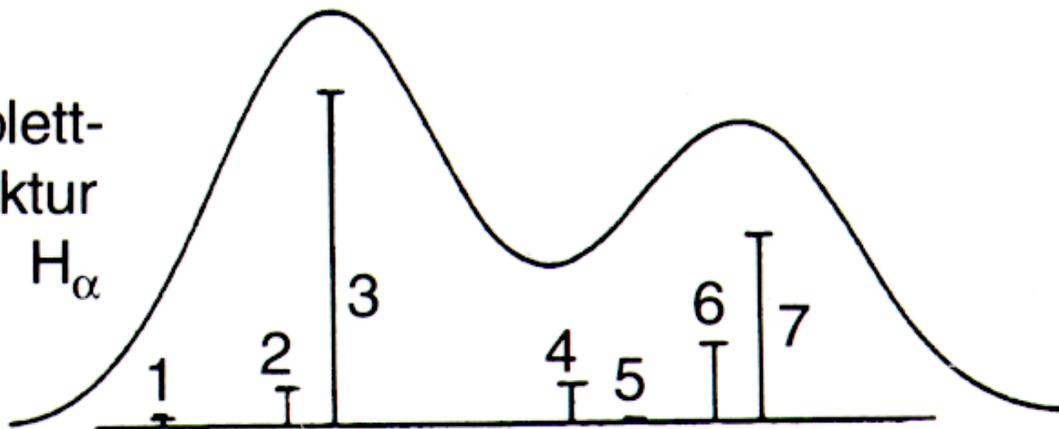
Energien im Wasserstoffatom (Kern unendlich schwer, $j = l \pm 1/2$: Gesamtdrehimpulsquantenzahl; α : Feinstrukturkonstante)

$$E_{n,j} = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 + \left[\frac{Z\alpha}{n - (j + 1/2) + \sqrt{(j + 1/2)^2 - (Z\alpha)^2}} \right]^2}} - m_0c^2$$

Balmer - H_α Feinstruktur-Auflösung im Experiment



Dublett-
struktur
von H_α



$$m > 2 \rightarrow n = 2$$

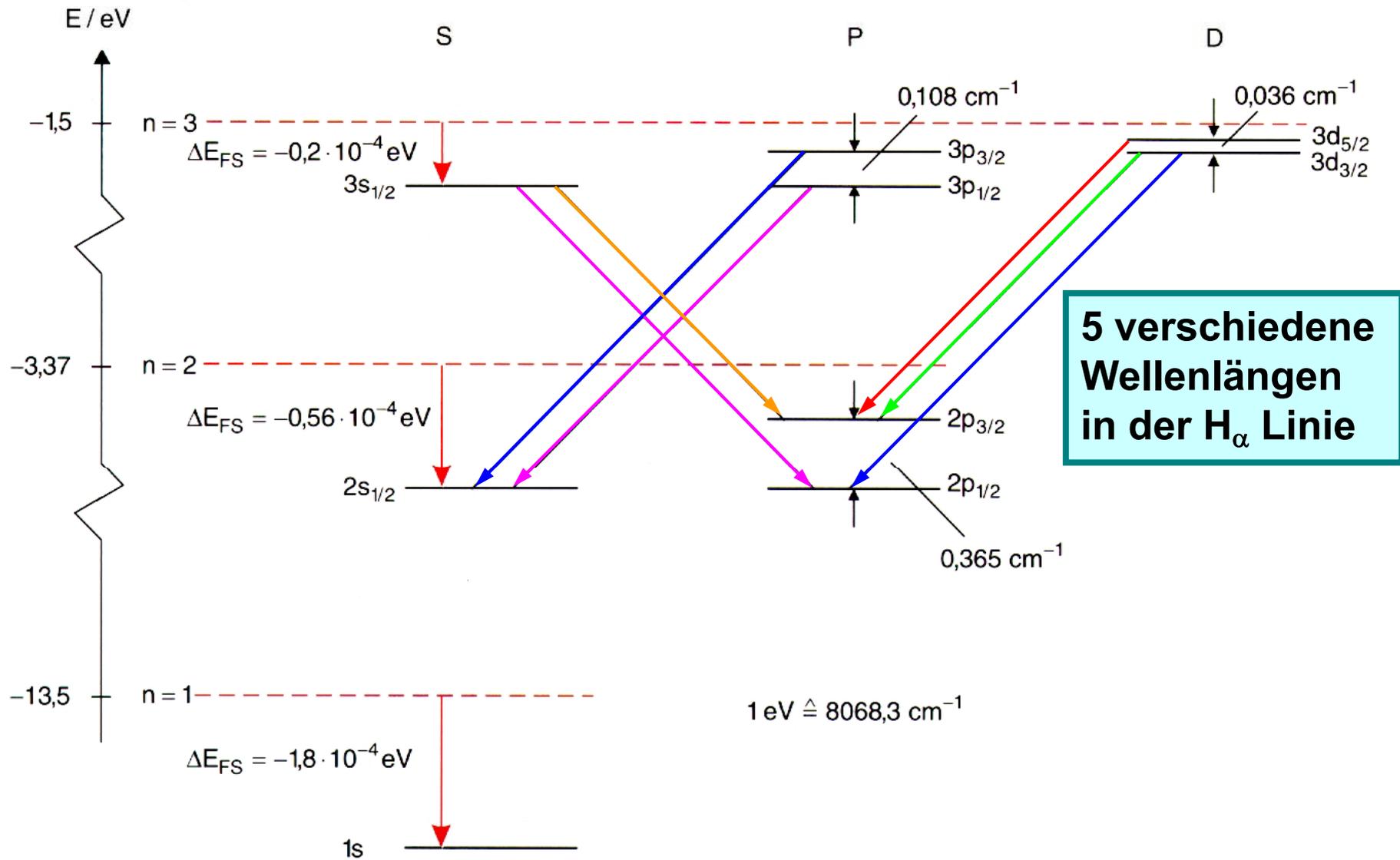
Dirac für $n=2$:

$$j = l \pm 1/2$$

$$\rightarrow j = 1/2 \text{ oder } j = 3/2$$

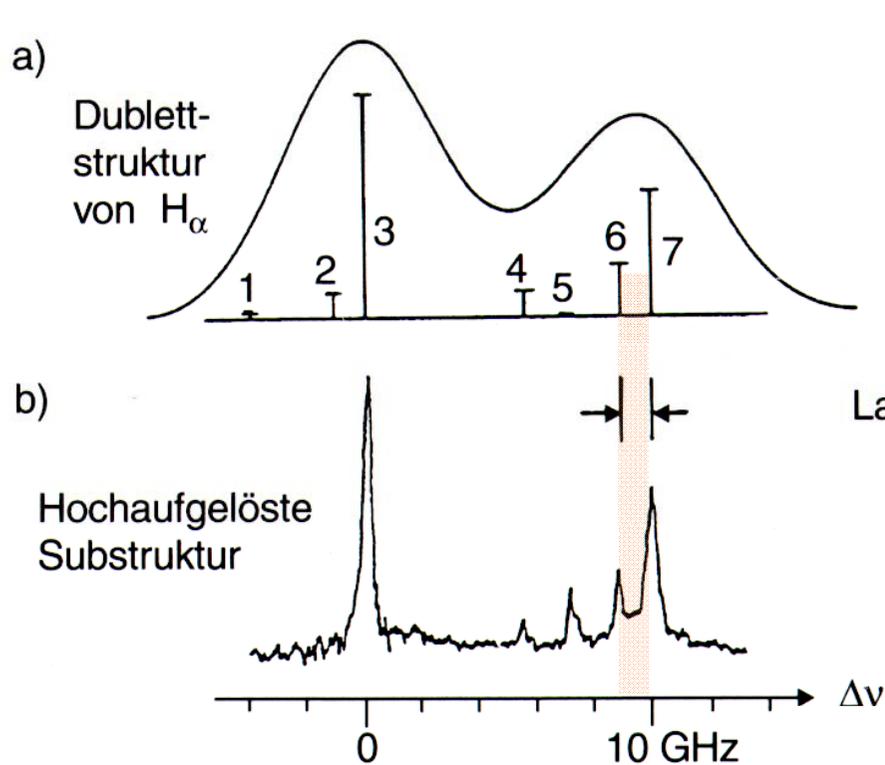
→ Duplettstruktur

Feinstrukturaufspaltung im Wasserstoffatom (Dirac)



$$E_{FS} = E_{n,j} - E_n = E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left[\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right] - \dots$$

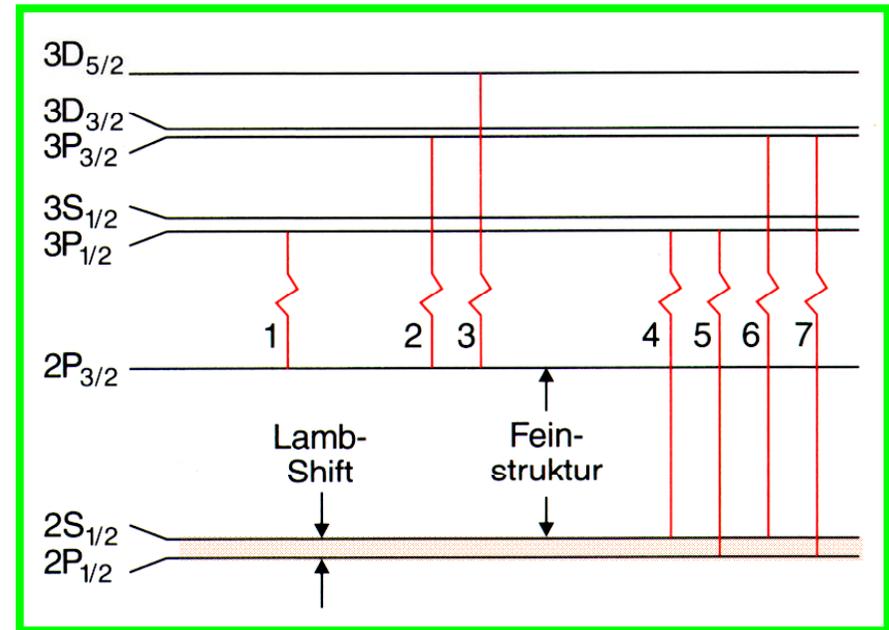
Experiment zeigt noch mehr Balmer – H α Linien



weitere Aufspaltung der Terme:
Lamb Verschiebung

Lamb-Shift

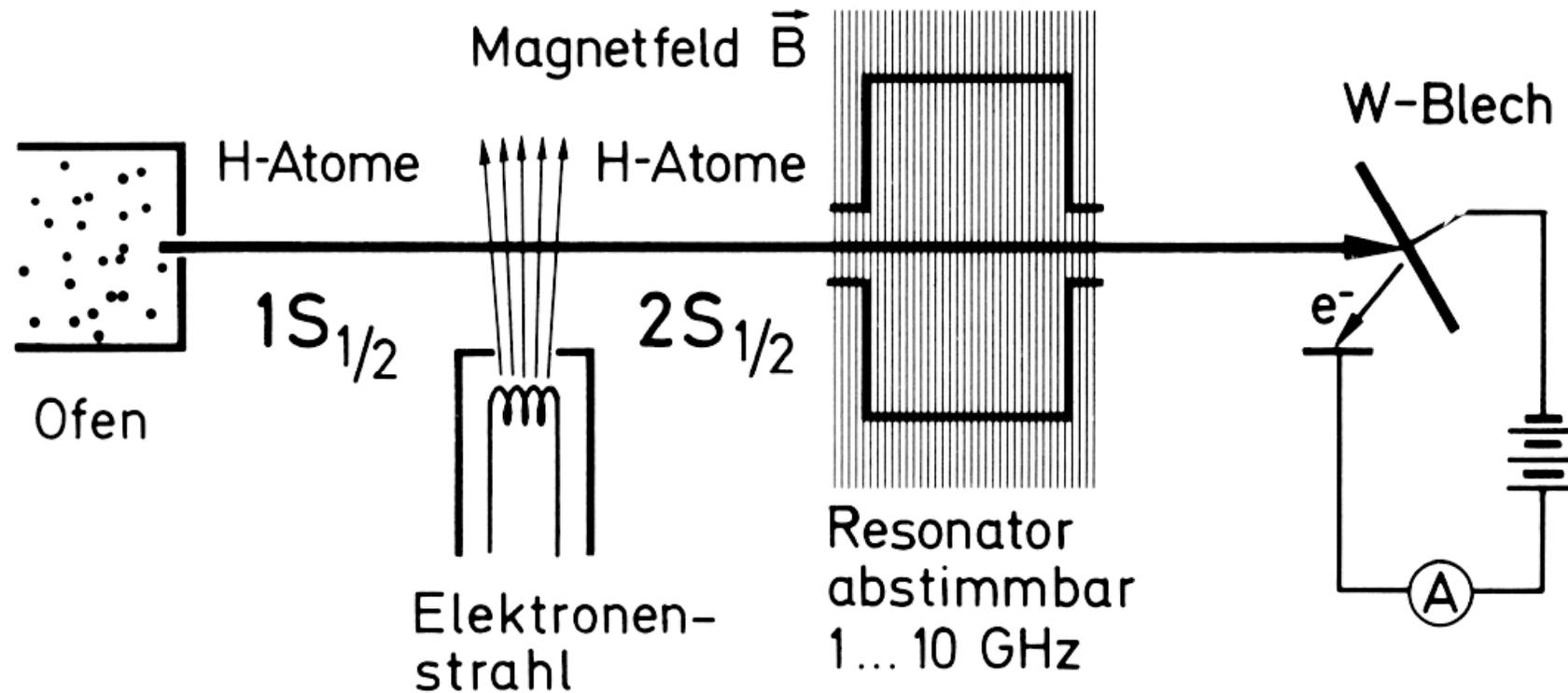
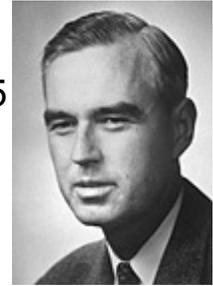
Gruppe T. Hänsch,
hochauflösende
Laserspektroskopie



Erste Beobachtung der Lamb Shift

Lamb und Retherford: Nobelpreisexperiment 1947

W. E. Lamb
Nobelpreis 1955

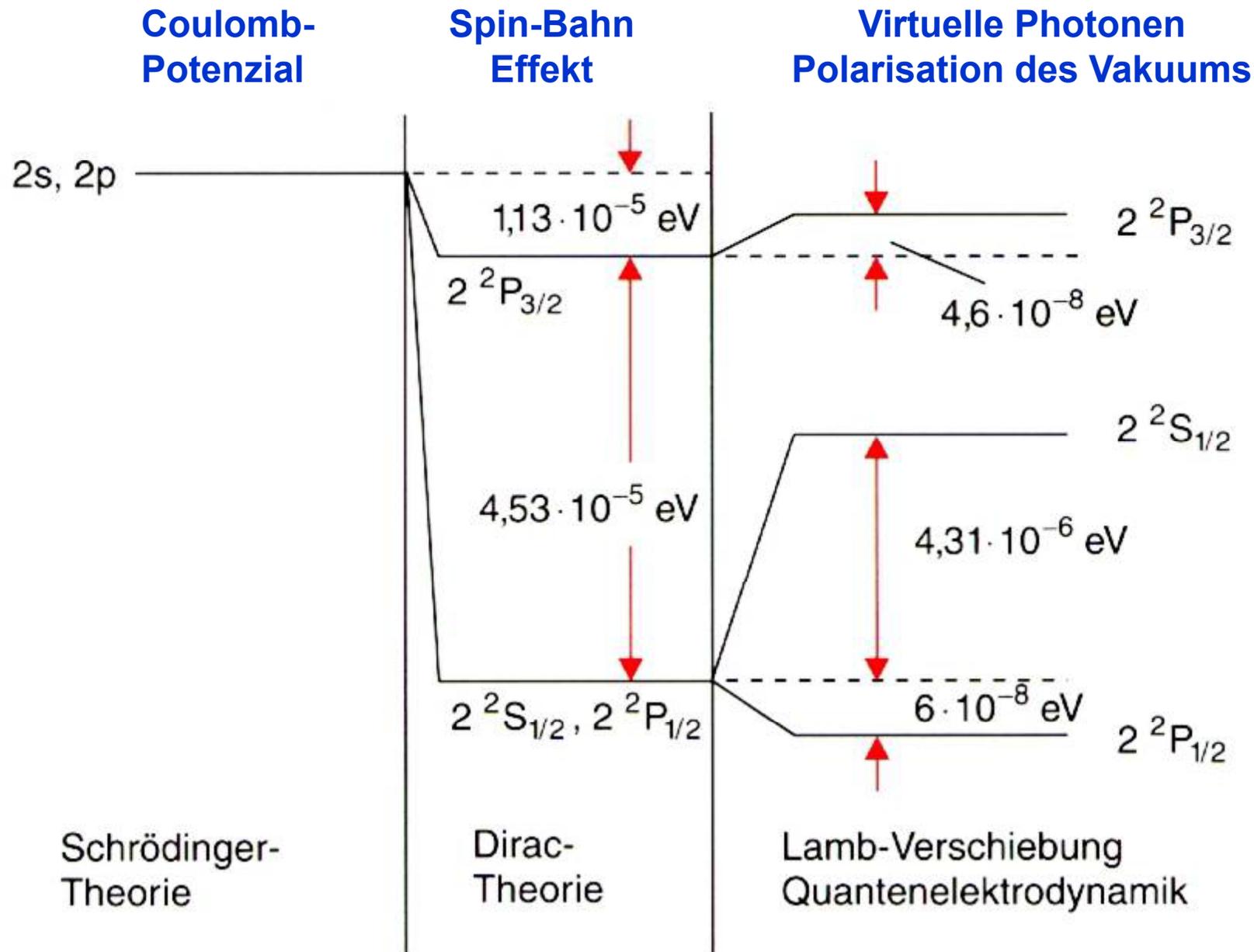


Besetzung
langlebiger
 $2s_{1/2}$
Zustände

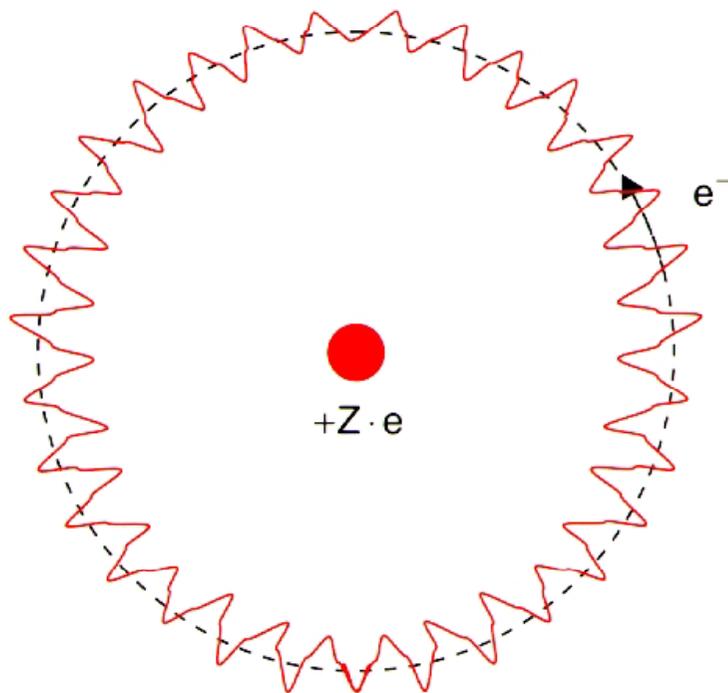
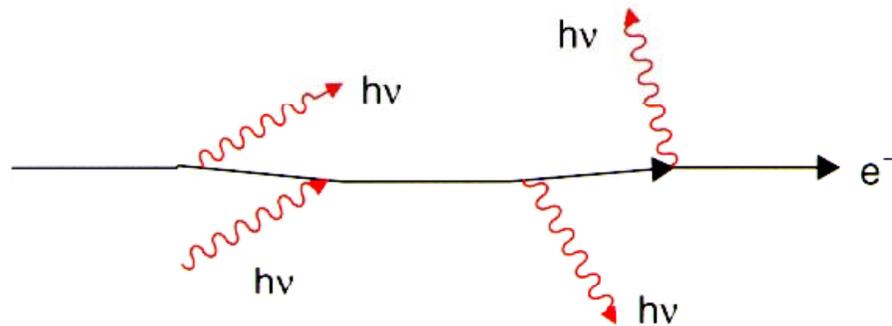
Übergänge
 $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2, 1/2}$
Extrapolation
zu $B=0$

Abfragen
der
 $2s_{1/2}$
Zustände

Lamb Shift – Resultat der Quantenelektrodynamik



Quantenelektrodynamik (QED) Selbstenergie



$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$ erlaubt kurzzeitige Verletzung des Energiesatzes

Elektron emittiert und absorbiert „virtuelle Photonen“

Das Elektron wechselwirkt mit seinem eigenen Feld (Selbstenergie)

Das Elektron vollführt durch die Impulsüberträge eine „Zitterbewegung“

Ein gebundenes Elektron sieht dadurch ein modifiziertes mittleres Coulomb Potenzial.



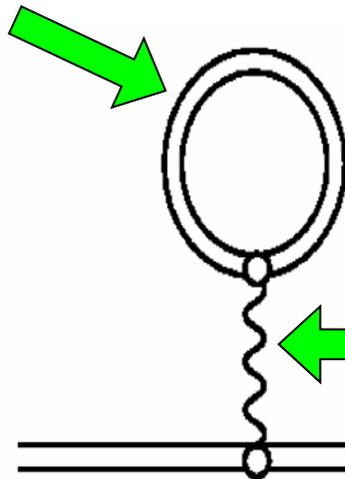
Feynman-Diagramm

Quantenelektrodynamik

Vakuumpolarisation

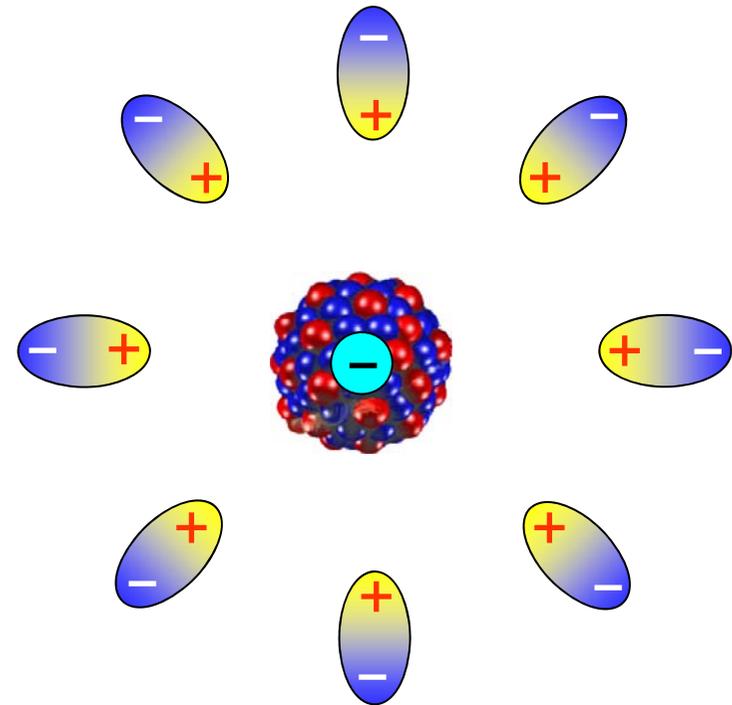
Feynman Diagramm für
Vakuumpolarisation in
niedrigster Ordnung

Virtuelles
 $e^+ e^-$ Paar



Wechselwirkung über
Photonenaustausch

Propagator eines
gebundenen Elektrons



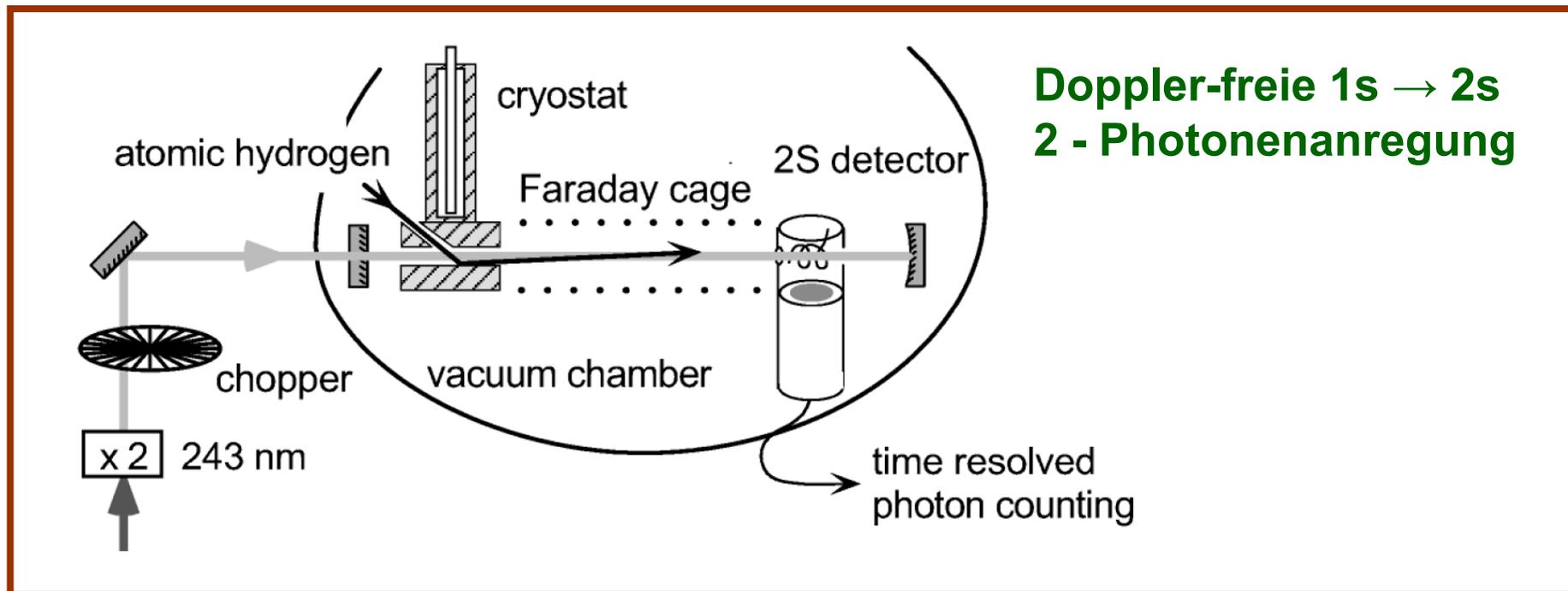
Elektron und Atomkern
modifizieren mit ihrer
Ladung den Dirac See

QED: bestgetestetes Theoriegebäude der Physik

Beispiel: Übergangsfrequenz $1s \rightarrow 2s$ im H-Atom

M. Niering et al., Phys. Rev. Lett. **84**, 5496 (2000)

V. A. Yerokhin, Phys. Rev. A **71**, 040101(R) (2005) (14.4.2005)



$f_{1s2s} = 2\,466\,061\,413\,187\,084\,(28)\text{ Hz}$ (zwischen den $1S$ und $2S$ HFS-Zentroiden
rel. Fehler: $1 \cdot 10^{-14}$)

$L_{1s} = 8\,172\,840\,(22)\text{ kHz}$ (Experiment Hänisch Gr., priv. Mitteilung Juni 2005)

$L_{1s} = 8\,172\,888\,(50)(4)\text{ kHz}$ (Theorie)

Problem: Radius des Protons

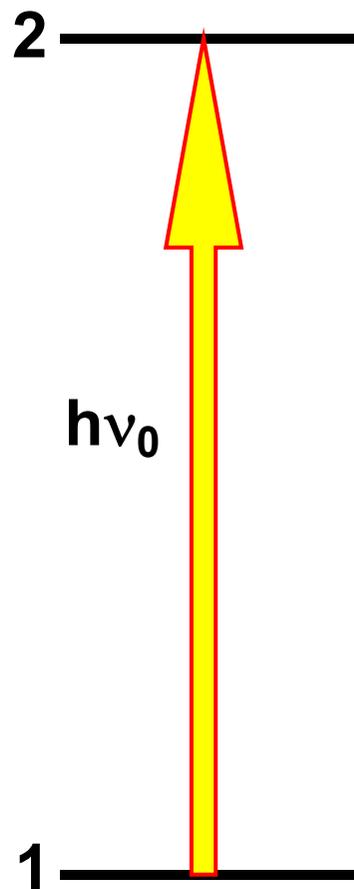
Optischer Dopplereffekt und Dopplerfreie Zweiphotonenabsorption

Ergänzung

zur Kurzvorstellung der modernen $1s \rightarrow 2s$
Präzisionsspektroskopie am Wasserstoffatom

Problemstellung: Bestimmung der Übergangsenergie zwischen atomaren Zuständen

Sei



Zustand 1 der Grundzustand eines Atoms mit Niveaubreite $\Gamma = 0$,

Zustand 2 ein angeregter Zustand mit endlicher (geringer) Breite Γ
($\Gamma = \hbar/(2\pi\tau)$, mit der Lebensdauer τ)

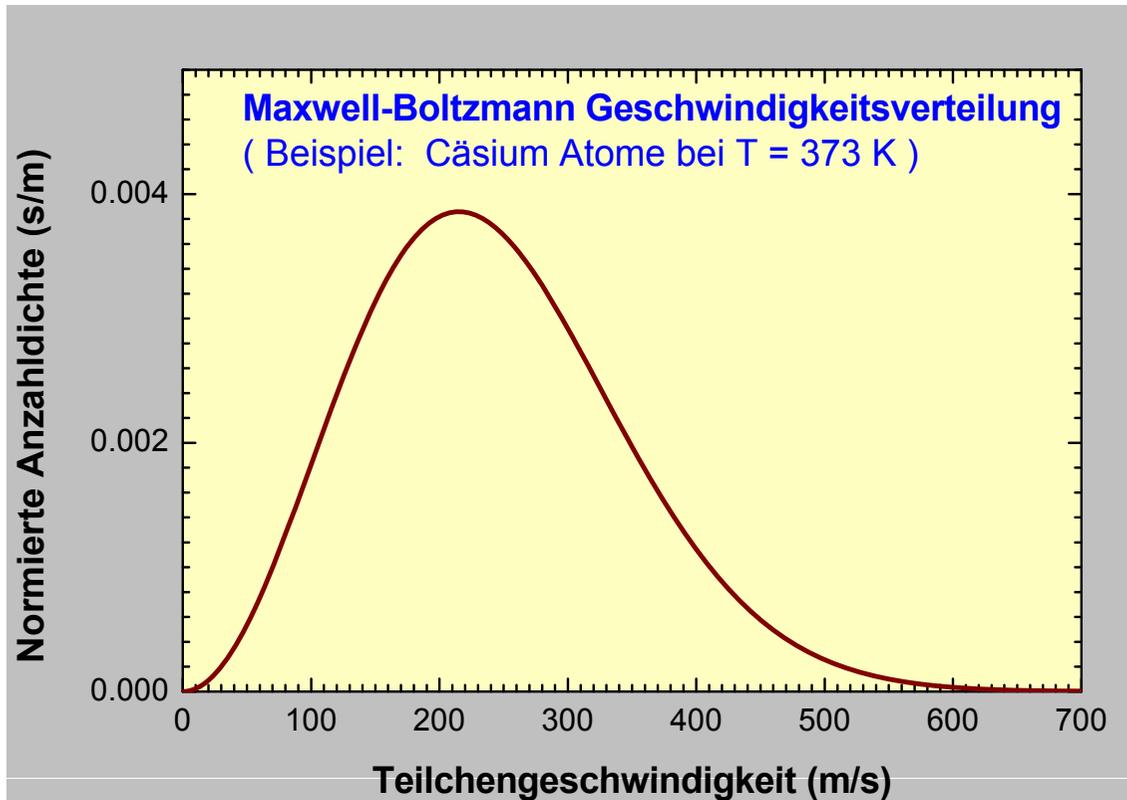
Gesucht:

Übergangsenergie $E_2 - E_1 = h\nu_0$

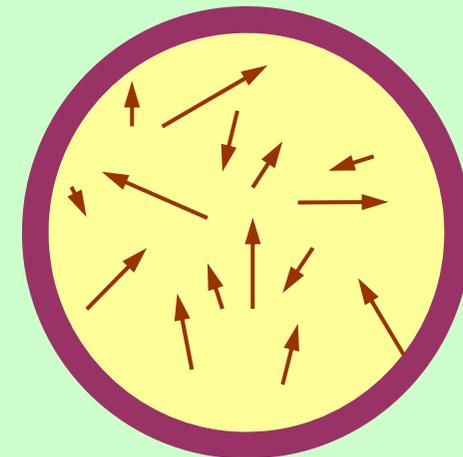
Vorgehensweise:

Einstrahlen von Laserlicht mit durchstimmbarer (geeichter) Frequenz

Temperatur und thermische Bewegung

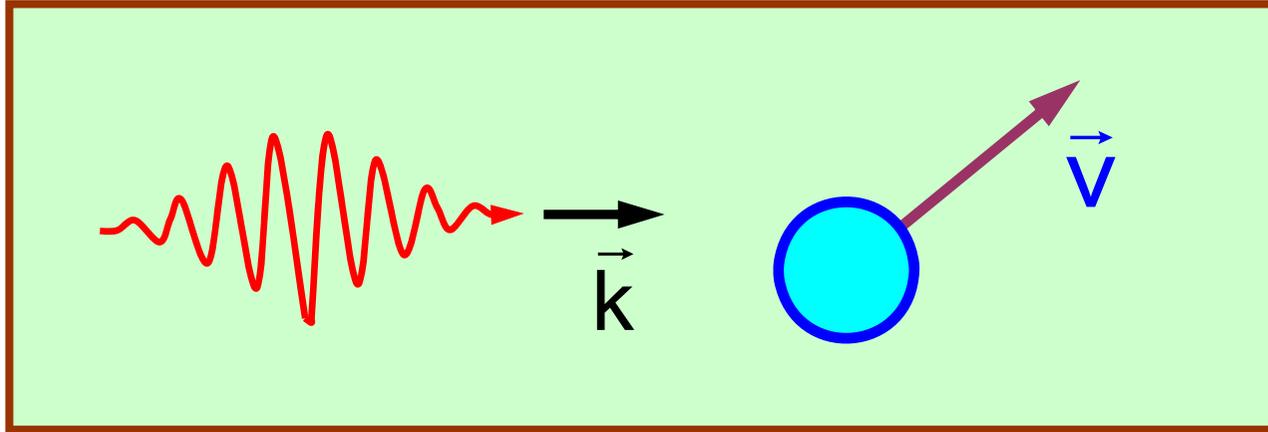


**Thermische Bewegung
der Atome**



Konsequenz:
Dopplerverschiebung und **Dopplerverschmierung**
einer eingestrahlten Frequenz ν_0

Zu beachten: der optische Dopplereffekt



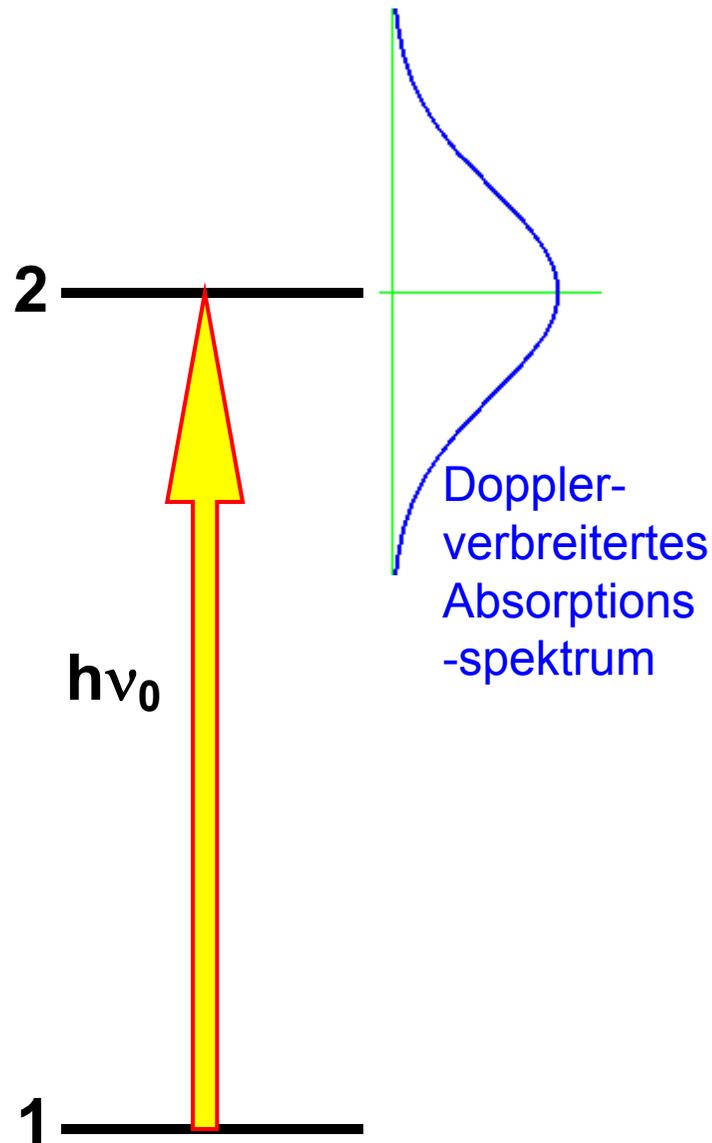
Ein Atom, das sich bezüglich des Wellenzahlvektors \vec{k} eines Photons der Frequenz ν_0 mit einer endlichen Geschwindigkeit \vec{v} bewegt, „sieht“ eine verschobene Photonenfrequenz ν

$$\nu = \frac{\nu_0 \left(1 - \frac{\vec{k} \cdot \vec{v}}{|\vec{k}|c} \right)}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c} \right)^2}}$$

c: Lichtgeschwindigkeit

Dopplerformel

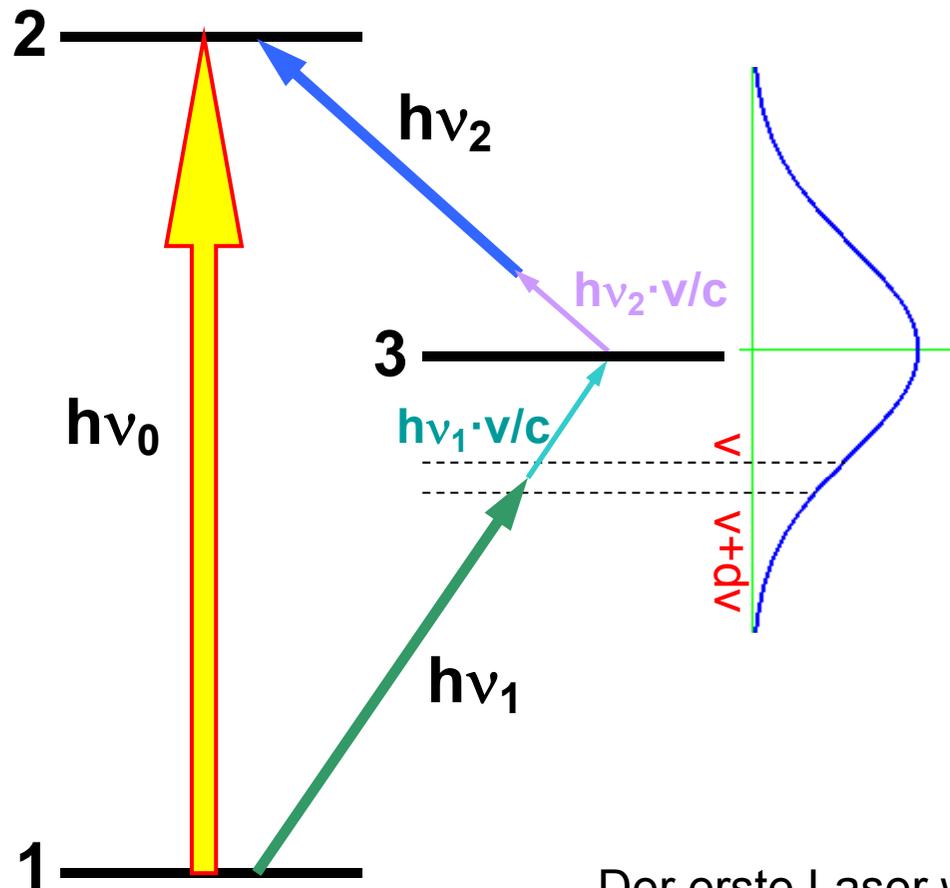
Problem: Dopplerverbreiterung des angeregten Niveaus



Die vom Laser der Frequenz ν_0 überstrichenen Atome bewegen sich mit Geschwindigkeiten v , die z.B. einer Maxwell-Boltzmann Verteilung gehorchen. Zu jedem v ergibt sich nach der Dopplerformel eine Lichtfrequenz, bei welcher Resonanz eintritt und damit der gewünschte Übergang induziert werden kann.

Auch bei großer Energieschärfe des Lasers und geringer Niveaubreite Γ ergibt sich beim Durchstimmen der Laserfrequenz ein breites Absorptionsband: es tritt „Dopplerverbreiterung“ des Niveaus auf

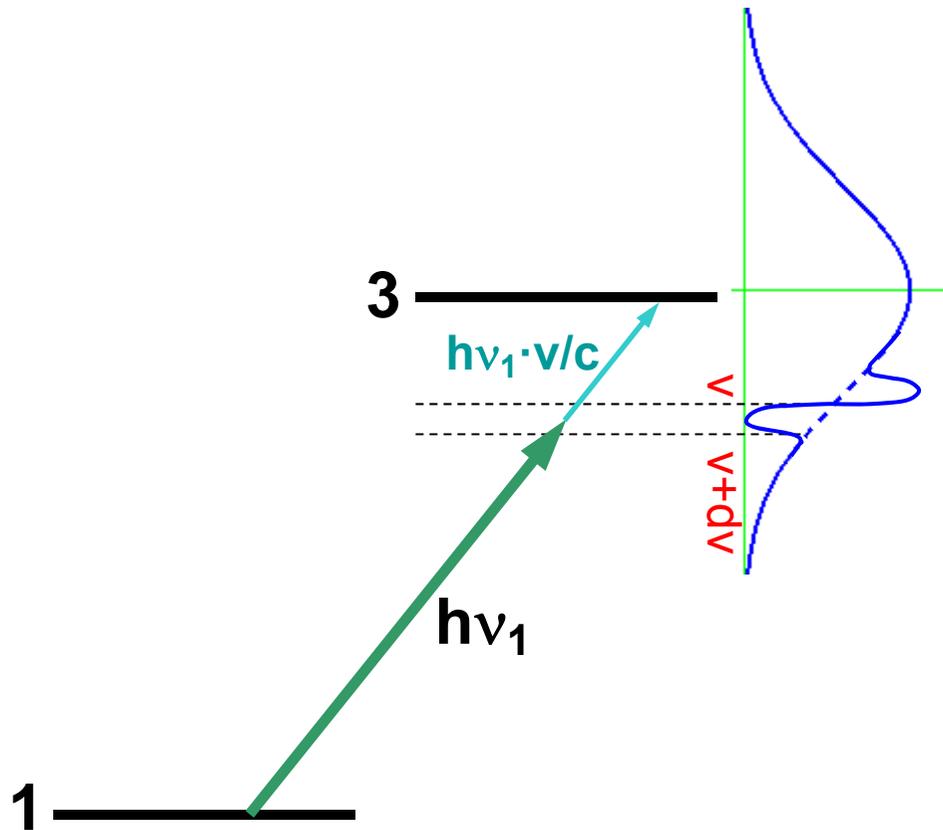
Zweiphotonenabsorption über ein Zwischenniveau



Durch Einstrahlen der Frequenz ν_1 wird das Zwischenniveau 3 in Atomen aus einer definierten Geschwindigkeitsklasse ($v, v+dv$) angeregt; v muss dann (entsprechend der nebenstehenden Zeichnung) -bei nicht zu hohen Geschwindigkeiten- die Gleichung $h\nu_1(1+v/c)=E_3-E_1$ erfüllen; mit einem zweiten, kolinearen Laser der Frequenz ν_2 wird das angeregte Niveau 2 erreicht, falls die Bedingung $h\nu_2(1+v/c)=E_2-E_3$ erfüllt ist.

Der erste Laser wählt eine schmale Geschwindigkeitsklasse der Atome aus, wodurch die $3 \rightarrow 2$ Anregung des Zustands 2 ausgehend von Atomen aus dieser Geschwindigkeitsklasse ein schmales Resonanzsignal liefert. Es gilt dann jedoch $h\nu_1(1+v/c) + h\nu_2(1+v/c) = E_3-E_1 + E_2-E_3$ bzw. $(h\nu_1 + h\nu_2)(1+v/c) = E_2-E_1$ mit nicht bekannter Geschwindigkeit v .

Weiterer Effekt: Übertrag von Photonenimpuls

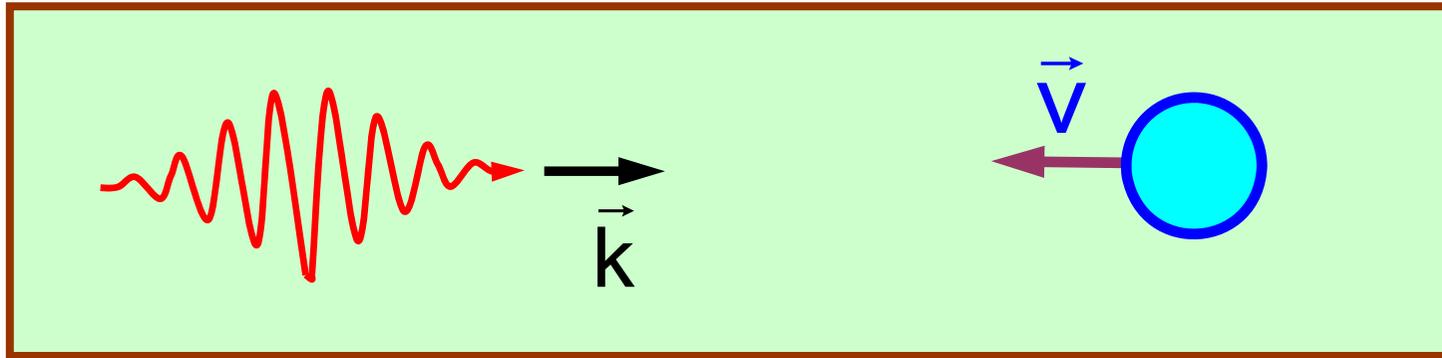


Durch Absorption eines Photons der Frequenz ν_1 wird auf das Atom ein Impuls $h / \lambda_1 = h\nu_1 / c$ übertragen. Bei genügend hoher Laserintensität wird die Geschwindigkeitsklasse $(v, v+dv)$ entvölkert und, dem Impulsübertrag entsprechend, um $h\nu_1 / mc$ verschoben, wobei m die Masse des Atoms ist.

Mit diesem Effekt kann man durch Laser-Einstrahlung (und dabei Verschiebung der Frequenz ν_1) Kräfte auf Atome oder Ionen ausüben. Diese Kräfte können Beschleunigung und Abbremsung der Teilchen bewirken.

Sie stellen damit eine Möglichkeit zur Kühlung von Teilchen-Ensembles dar, was die Voraussetzung für Speicherung der Teilchen, für die Erzeugung von Ionenkristallen in Fallen und letztlich die Realisierung von Bose-Einstein Kondensaten ist.

Übertrag von Photonenimpuls



Durch Absorption eines Photons der Frequenz ν_0 wird auf das Atom ein Impuls

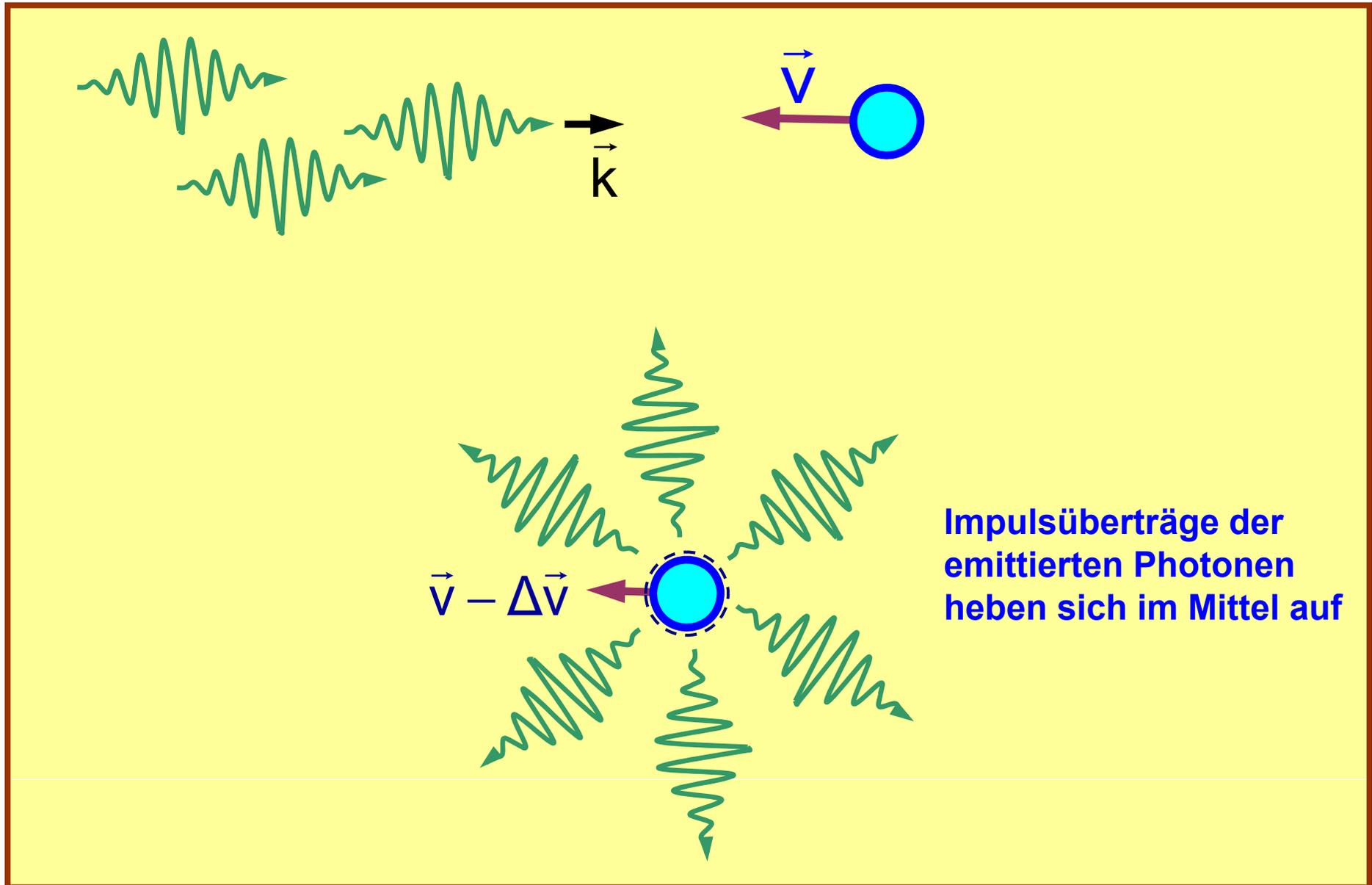
$$h / \lambda = h\nu_0 / c = \Delta p_{\text{Atom}} = M\Delta v$$

übertragen. Entsprechend ändert sich die Geschwindigkeit bzw. die kinetische Energie des Atoms. Mit diesem Effekt kann man durch Einstrahlung rotverschobener Photonen Atome abbremsen (oder beschleunigen).

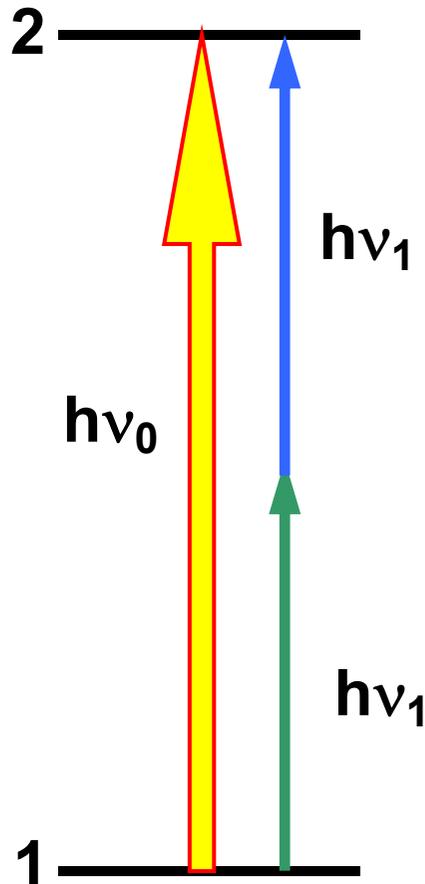
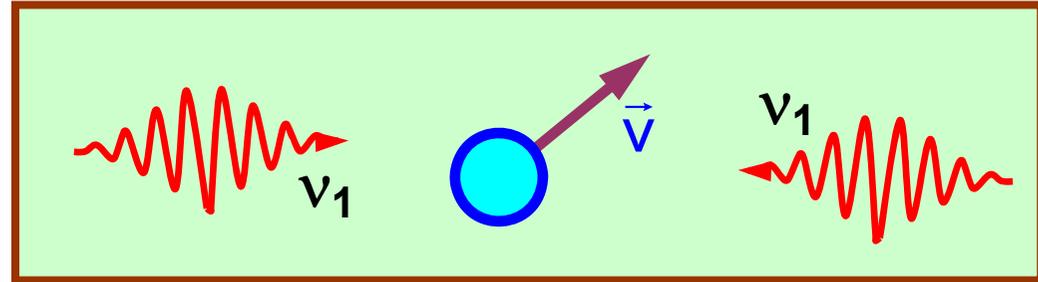
Beispiel: 852.1 nm Photon absorbiert von einem Cs Atom $\Delta v = h\nu_0 / Mc$
resultiert in einem Geschwindigkeitsunterschied **0.0035 m/s**

ca. 50000 Photonen (angepasster Frequenzen) müssen bis zum Abstoppen absorbiert werden

Aufnahme gerichteter und Emission ungerichteter Photonen: Resultat Abbremsung



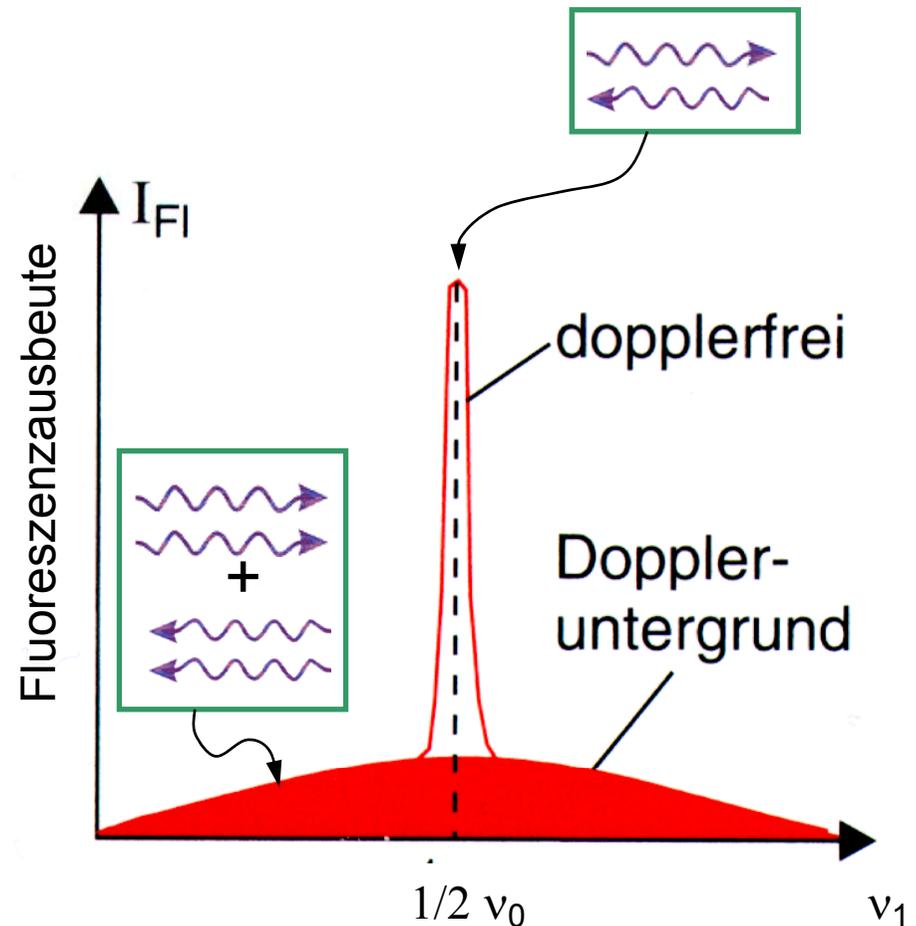
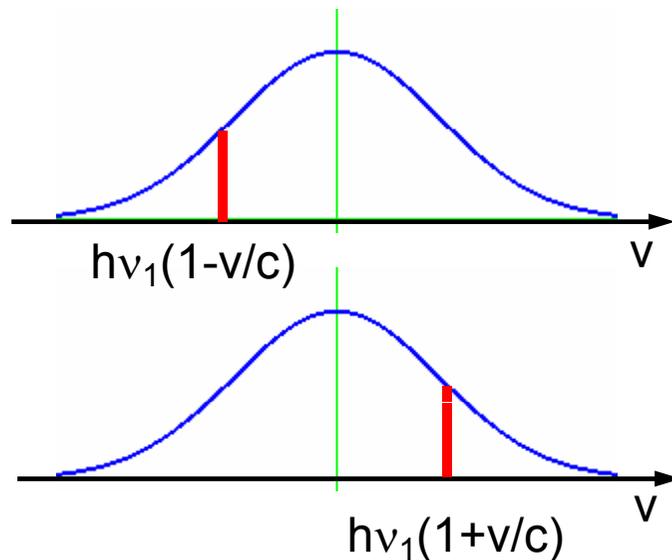
Dopplerfreie Zweiphotonenabsorption ohne Zwischenniveau



Durch Einstrahlen der Frequenz ν_1 wird in Atomen aus einer beliebigen Geschwindigkeitsklasse ($v, v+dv$) der virtuelle Zwischenzustand mit der Energie $h\nu_1(1+v/c)$ erreicht; bei genügend hoher Intensität der Laserstrahlung wird durch einen zweiten, entgegengesetzt gerichteten Laser der Frequenz ν_1 – ausgehend von den „Energie-markierten“ Atomen – eine **Gesamtenergie** $h\nu_1(1+v/c) + h\nu_1(1-v/c) = 2h\nu_1$ erreicht (2 Photonen werden aufeinander gestockt). Falls die Bedingung $\nu_0 = 2h\nu_1$ erfüllt ist, tritt schmalbandig resonante Anregung des Niveaus 2 auf. Prinzipiell können alle Atome unabhängig von ihrer Geschwindigkeiten mit den antiparallelen Lichtquanten effizient in den Zustand 2 gehoben werden. (Die gegenseitigen Impulsüberträge heben sich zudem auf.)

Dopplerfreie Zweiphotonenspektroskopie

Antiparallele Photonenstrahlen identischer Frequenz erhält man durch Einsatz eines Resonators mit verspiegelten Endfenstern



Summe der Energien, die durch Absorption zweier antiparallel orientierter Photonen der Frequenz ν_1 vom Atom aufgenommen werden:

$$h\nu_1(1-\nu/c) + h\nu_1(1+\nu/c) = 2h\nu_1$$

Bei $\nu_0 = 2\nu_1$ tritt verstärkt ein **Resonanzsignal** auf (stärker als in der Abbildung).

Rydbergkonstante R_∞

$$\frac{\Delta R_\infty}{R_\infty} \approx 7 \cdot 10^{-12}$$

Fundamental Physical Constants

[Click symbol for equation](#)

Rydberg constant R_∞

Value **10 973 731.568 527 m⁻¹**

Standard uncertainty 0.000 073 m⁻¹

Relative standard uncertainty 6.6 x 10⁻¹²

Concise form **10 973 731.568 527 (73) m⁻¹**

[Click here](#) for correlation coefficient of this constant with other constants

[Source: 2006 CODATA recommended values](#)

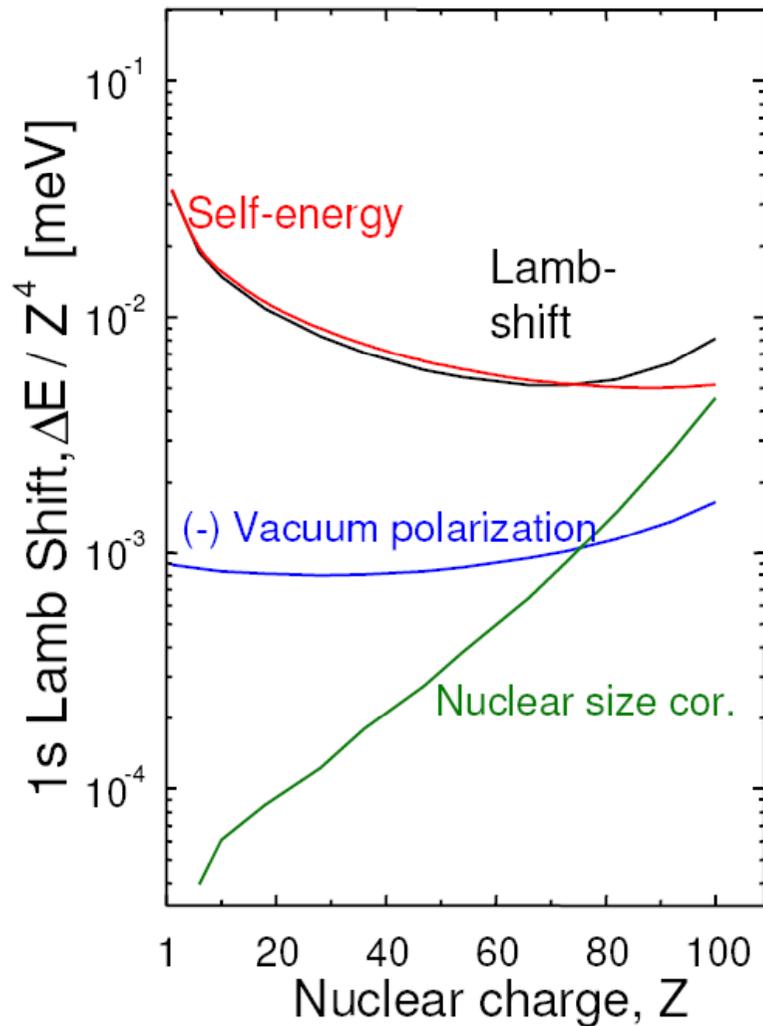
[Definition of uncertainty](#)

[Correlation coefficient with any other constant](#)

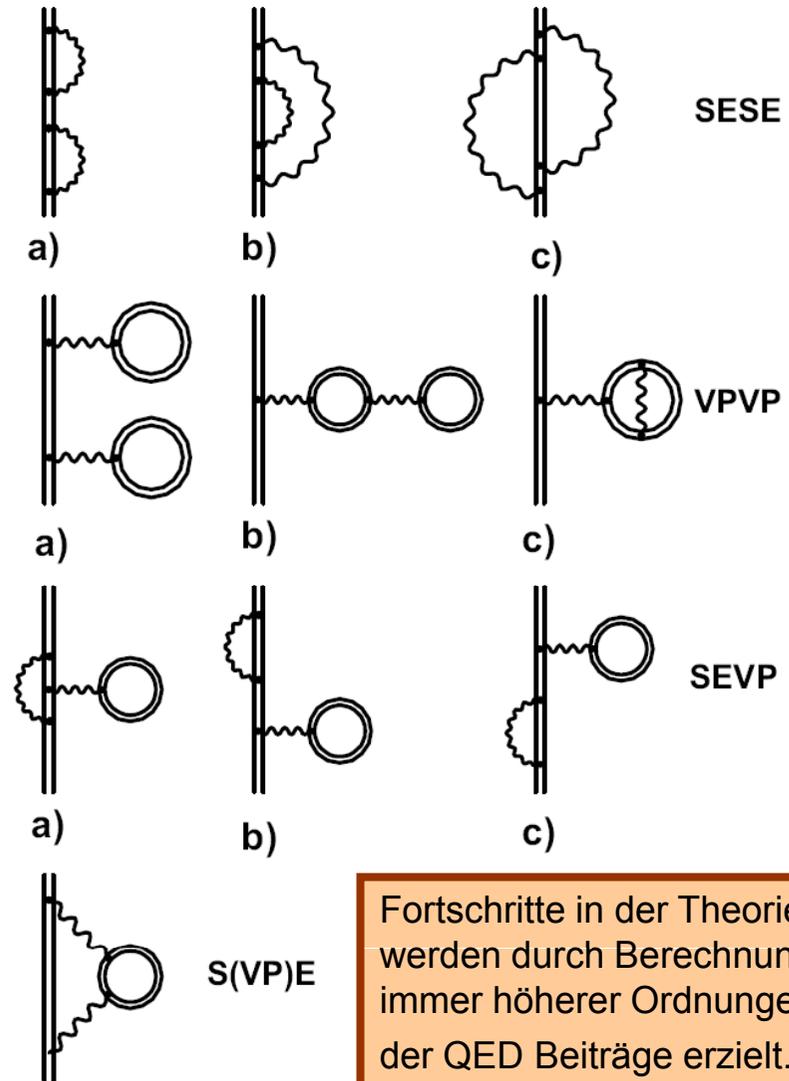
QED in starken Feldern

VP Beiträge wachsen z.B. mit Z^4

$$\Delta E = \alpha/\pi (\alpha Z)^4 F(\alpha Z) m_e c^2$$



Two-loop Korrekturen der Ordnung α^2
 SE: Selbstenergie
 VP: Vakuumpolarisation



Fortschritte in der Theorie werden durch Berechnung immer höherer Ordnungen der QED Beiträge erzielt.

Elektrische Feldstärke, die ein Elektron im Grundzustand eines H-ähnlichen Atoms erfährt

$$\langle E \rangle = \int \Psi_{1s}^* \mathbf{E} \Psi_{1s} d\tau$$

Einsetzen der Schrödinger-Wellenfunktionen

$$\langle E \rangle = \int \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0} \left[\frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r^2} \right] \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0} 4\pi r^2 dr$$

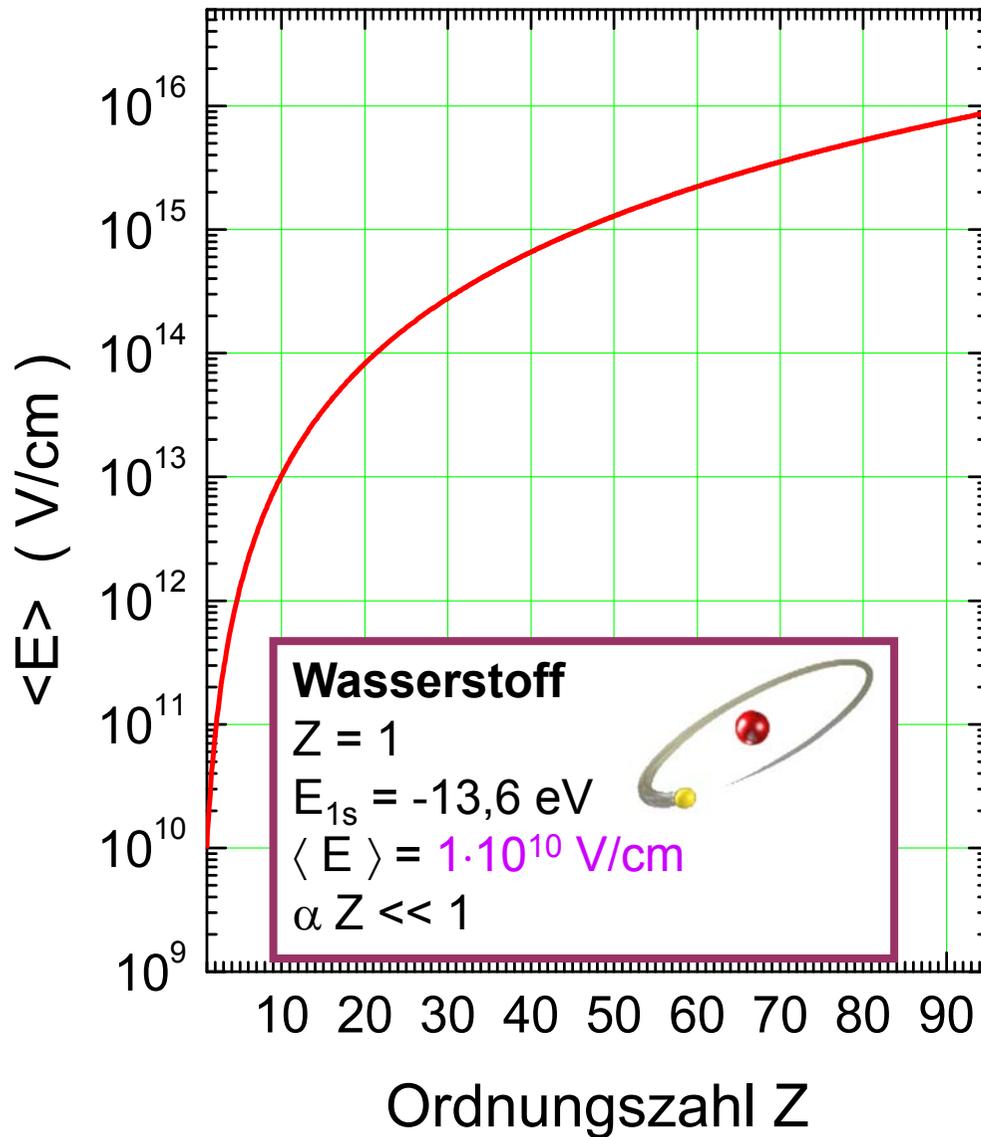
$$\langle E \rangle = \int \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 e^{-2Zr/a_0} \left[\frac{-Zea_0}{\epsilon_0 2Z} \right] d\left(\frac{-2Zr}{a_0} \right)$$

$$\langle E \rangle = \frac{-ea_0}{\epsilon_0 2\pi} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 e^x \Big|_0^{-\infty}$$

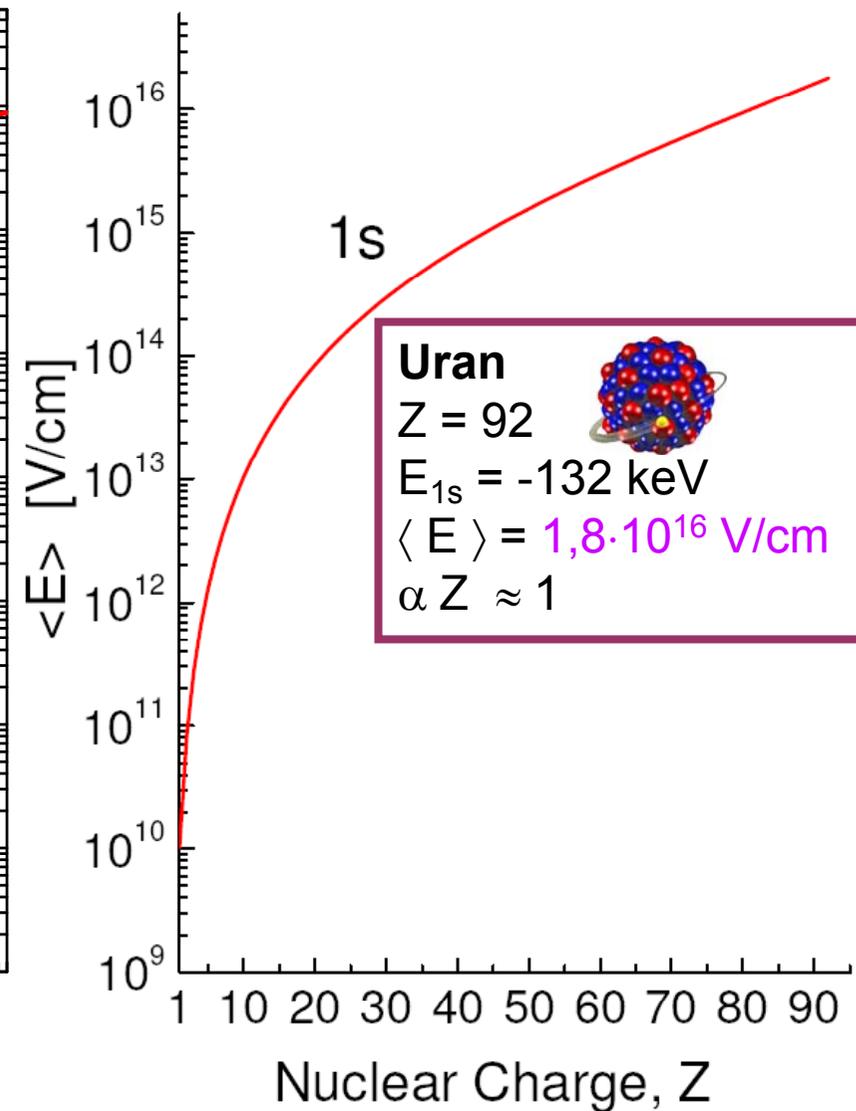
$$\langle E \rangle = \frac{eZ^3}{\epsilon_0 2\pi a_0^2} = 1.03 \times 10^{12} Z^3 \frac{\text{V}}{\text{m}}$$

Elektrische Feldstärken in H-ähnlichen Atomen

Coulomb Potenzial



Dirac Beschreibung



H-ähnliches Uran U^{91+} : Energie des Grundzustands

Bohr-Modell bzw. Schrödinger mit Coulomb Potenzial:

$$E_1 = -13.605\,661 \text{ eV} \cdot Z^2 = 115\,158 \text{ eV}$$

Dirac

$$E_{1s} = -132\,279.925 \text{ eV}$$

$$E_{1s} = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 + \left[\frac{Z\alpha}{1 - (1/2 + 1/2) + \sqrt{(1/2 + 1/2)^2 - (Z\alpha)^2}} \right]^2}} - m_0 c^2$$

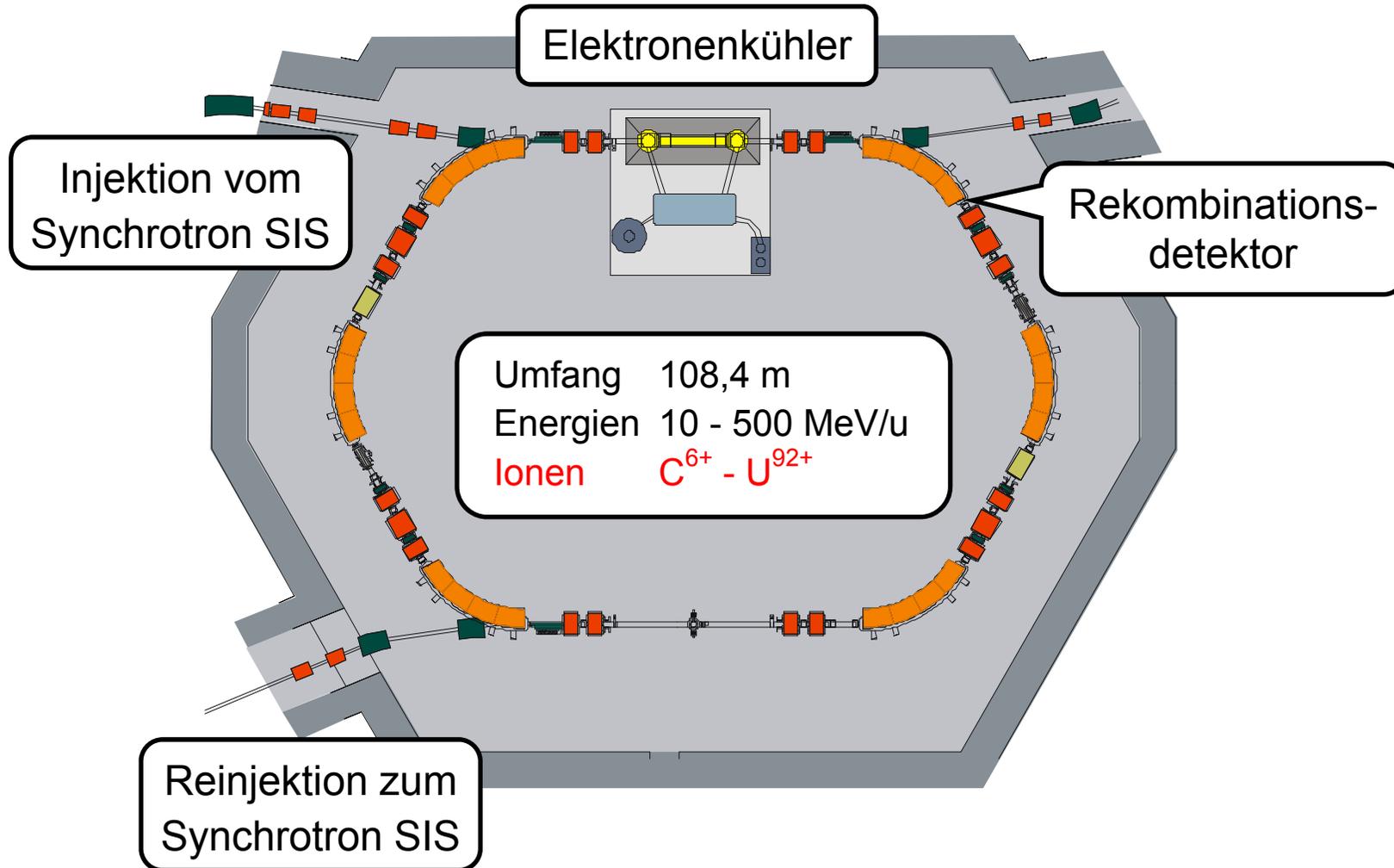
Dirac + QED

$$E_{1s} = -131\,815.67 \text{ eV}$$

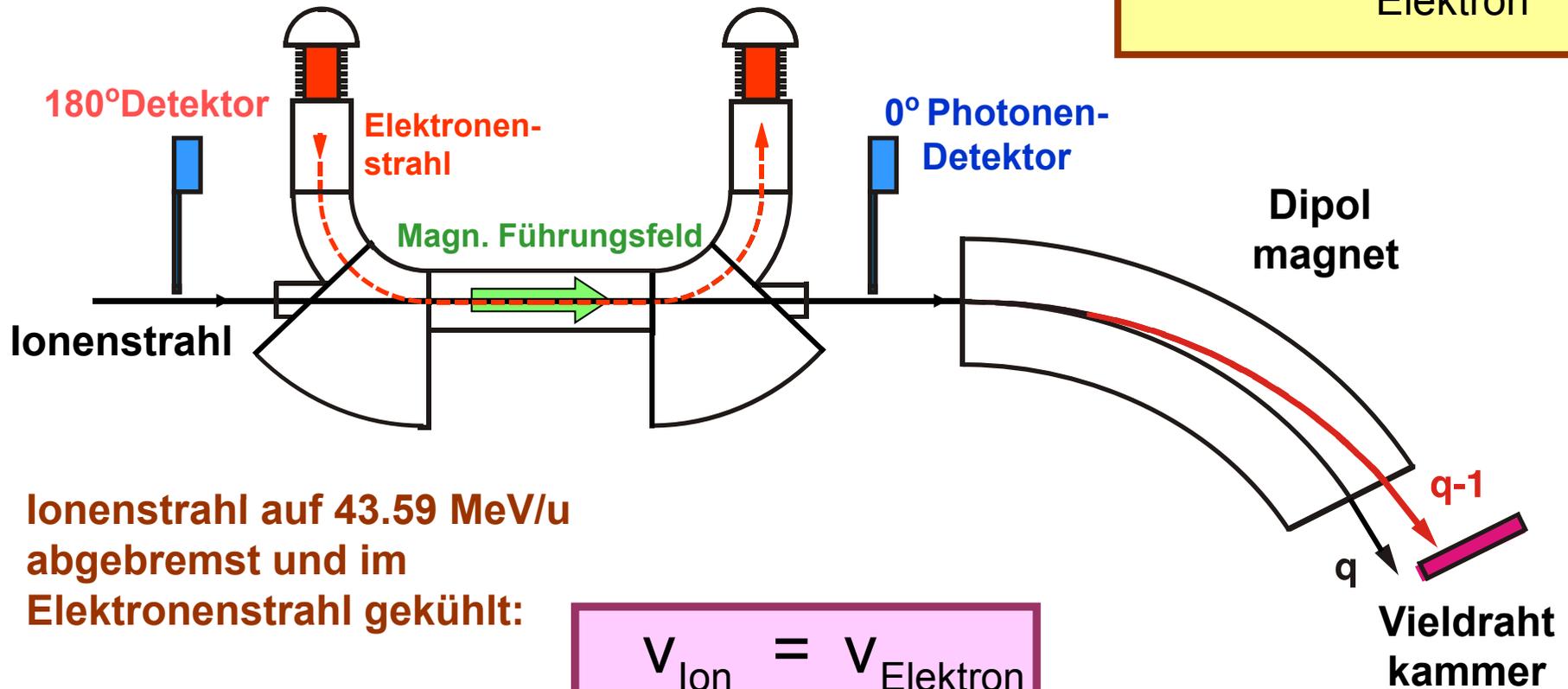
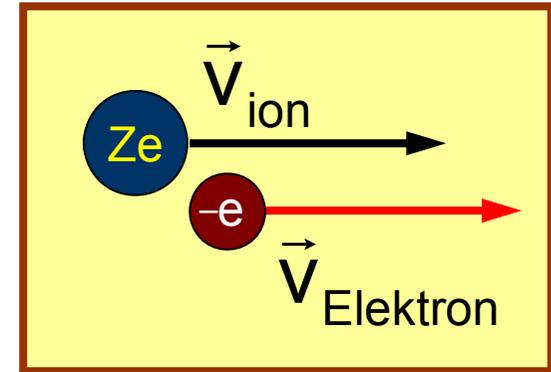
Theorie: $E1 = -132\,279.925 \text{ eV} + 464.26(50) \text{ eV}$
V. A. Yerokhin et al., Phys. Rev. Lett. **91**, 073001 (2003).

Experiment: $E1 = -132\,279.925 \text{ eV} + 460.2(46) \text{ eV}$
A. Gumberidze et al., Phys. Rev. Lett. **94**, 223001 (2005).

Experiment - Speicherring ESR der GSI



Elektronenkühler des ESR



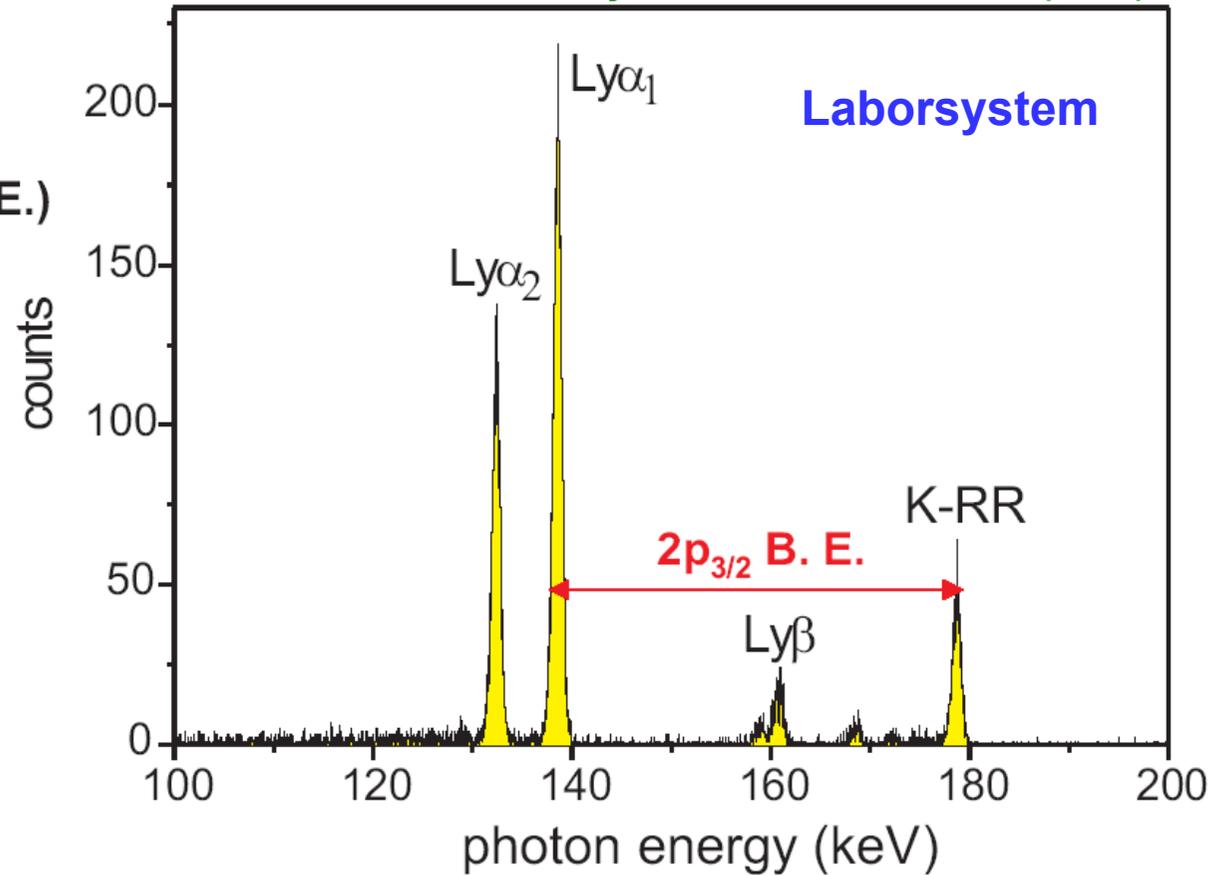
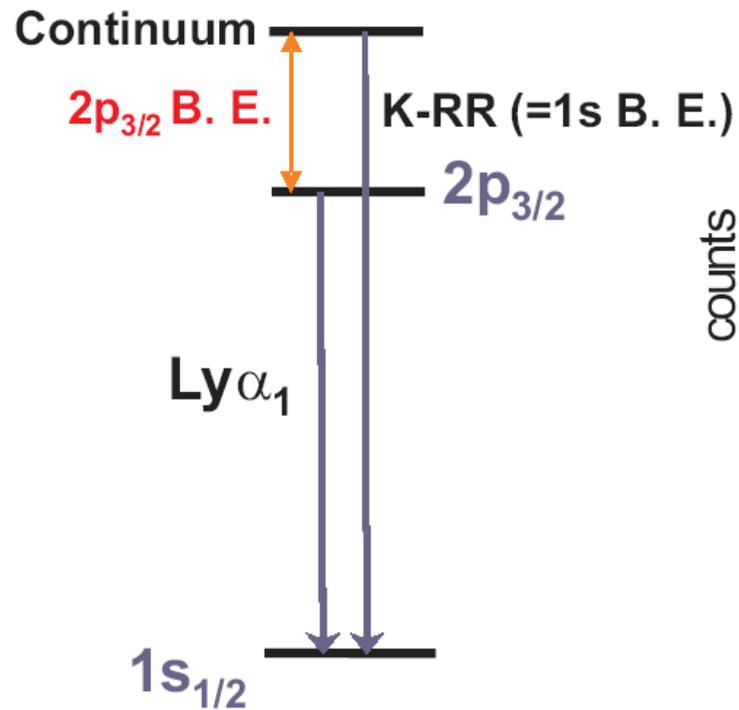
Ionenstrahl auf 43.59 MeV/u
abgebremst und im
Elektronenstrahl gekühlt:

$$v_{\text{Ion}} = v_{\text{Elektron}}$$

$$E_{\text{relativ}} = 0$$

Messung der 1s Lamb Verschiebung in U^{91+}

A. Gumberidze et al., Phys. Rev. Lett. 94, 223001 (2005)



Umrechnung in das Ruhesystem von U^{91+}

$$E = E_{\text{LAB}} \cdot \gamma \cdot (1 - \beta \cos \theta_{\text{LAB}}) \quad \rightarrow \quad E_{\text{K-RR}} = E_{1s} = -131\,819.7 \text{ eV}$$

Hyperfeinstruktur

Magnetische Momente von Proton und Neutron

Proton: Spin $\frac{1}{2}$ $g_P = 5.585\,694\,701(56)$

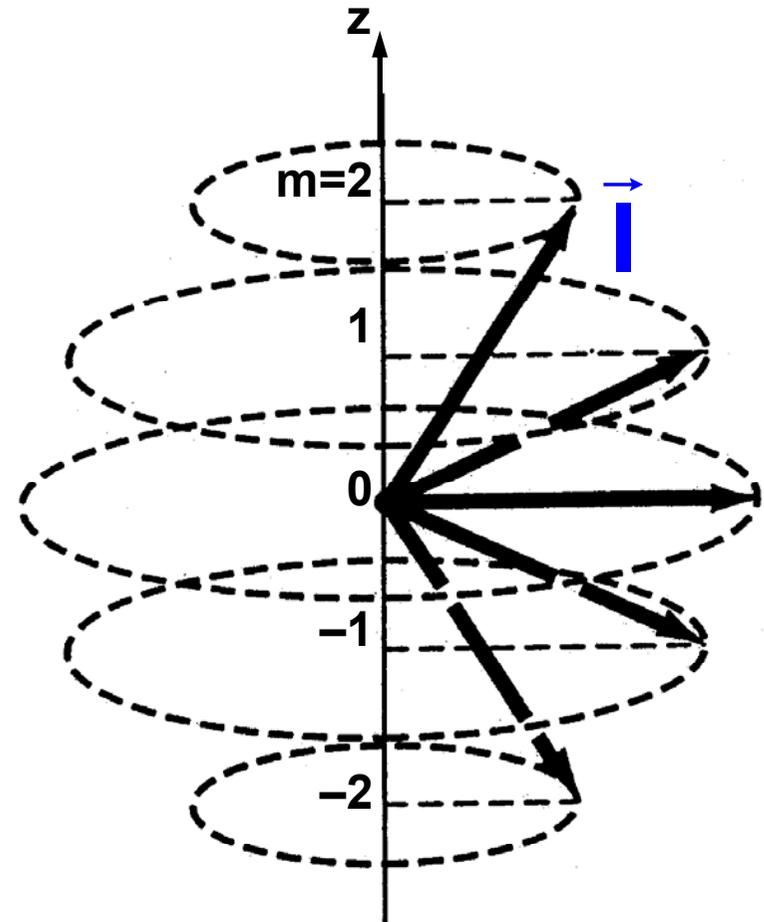
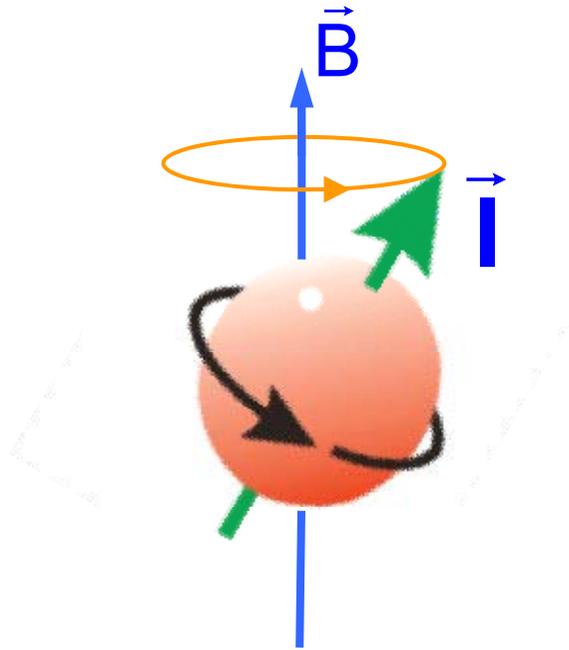
$\mu_P = 2.792\,847\,351(28)$

Neutron: Spin $\frac{1}{2}$ $g_N = -3.826\,085\,46(90)$

$\mu_N = -1.913\,042\,73(45)$

Committee on Data for Science and Technology (CODATA 2002)

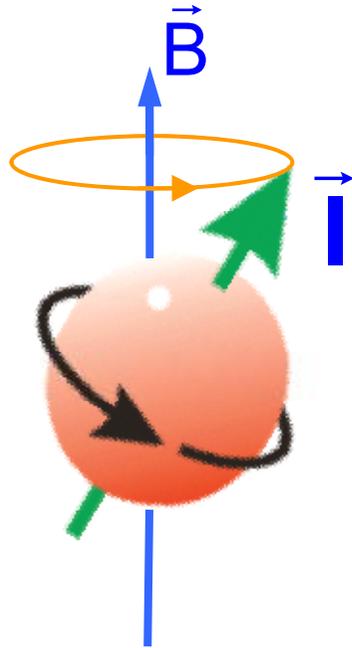
Richtungsquantelung



Kernspin und zugehöriges **magnetisches Moment** des Kerns stellen sich in einem äußeren Feld so ein, dass ihre **z-Komponenten** sich um **ganzzahlige Vielfache** der zugehörigen Einheiten unterscheiden

Beispiel: Messwerte für die **z-Komponenten des Spins** $m\hbar$ ($m = -l, -l+1, \dots, l$)

Magnetisches Moment eines Kerns



Formal ist das magnetische Moment ein Vektor

$$\vec{\mu}_I$$

Wie bei den Drehimpulsen ist hiervon nur die z-Komponente messbar

Die **maximal beobachtbare z-Komponente** nennt man das magnetische Moment μ_I des Kerns

Magnetisches Moment eines Kerns mit Spin I

$$\mu_I = g_i \mu_K I$$

g_i :

Landé-Faktor des Kerns

$$\mu_K = \frac{e}{2m_p} \hbar :$$

Kernmagneton mit der Protonenmasse m_p

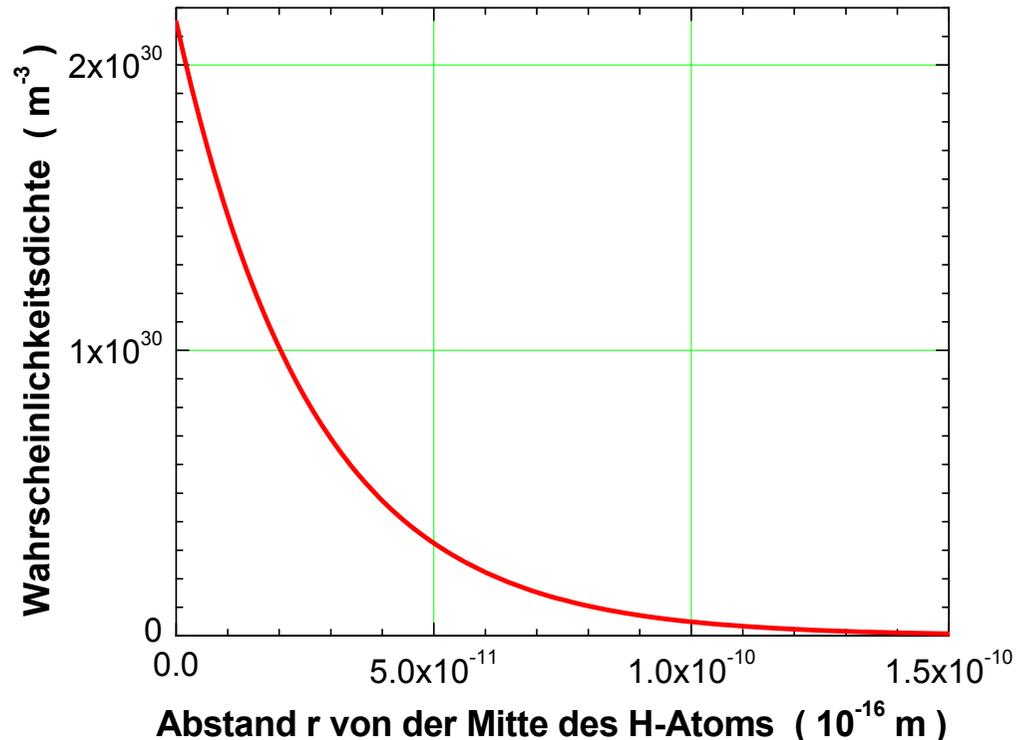
Räumliche Dichte der Elektronen im H-Atom

Elektron im Grundzustand des Wasserstoffatoms: $n=1, l=0, m=0$

Frage: wie hoch ist die Wahrscheinlichkeitsdichte, das Elektron an einem Ort \vec{r} anzutreffen?

$$|\Psi_{1,0,0}(\vec{r})|^2 = |\Psi_{1,0,0}(r)|^2 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} e^{-2Zr/a_0}$$

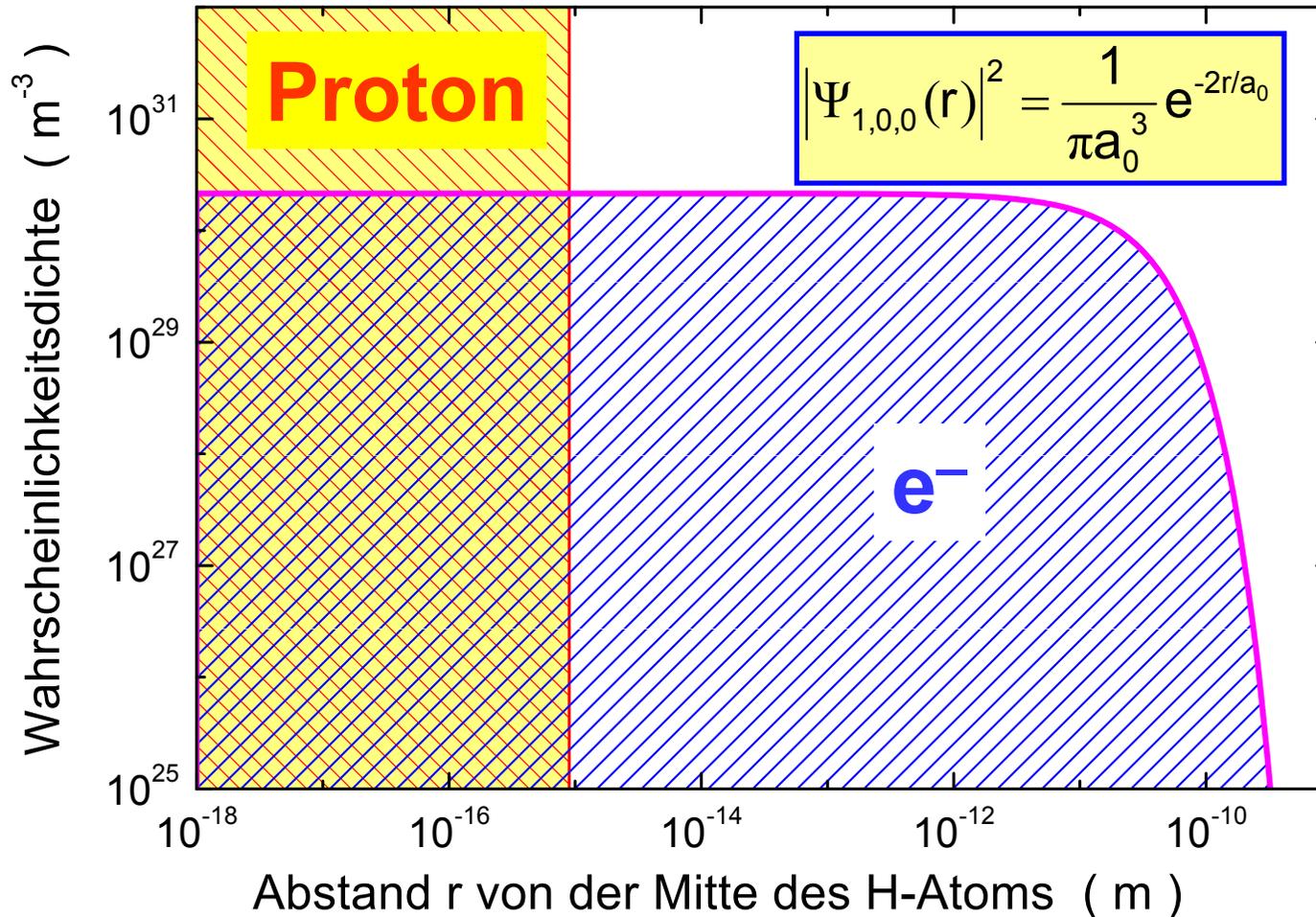
Z : Ordnungszahl
 $a_0 = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m}$



Die **Wahrscheinlichkeitsdichte** nimmt exponentiell mit dem Abstand r vom Zentrum des Atoms ab; sie ist **am größten bei $r=0$** , d.h. am Ort des Atomkerns

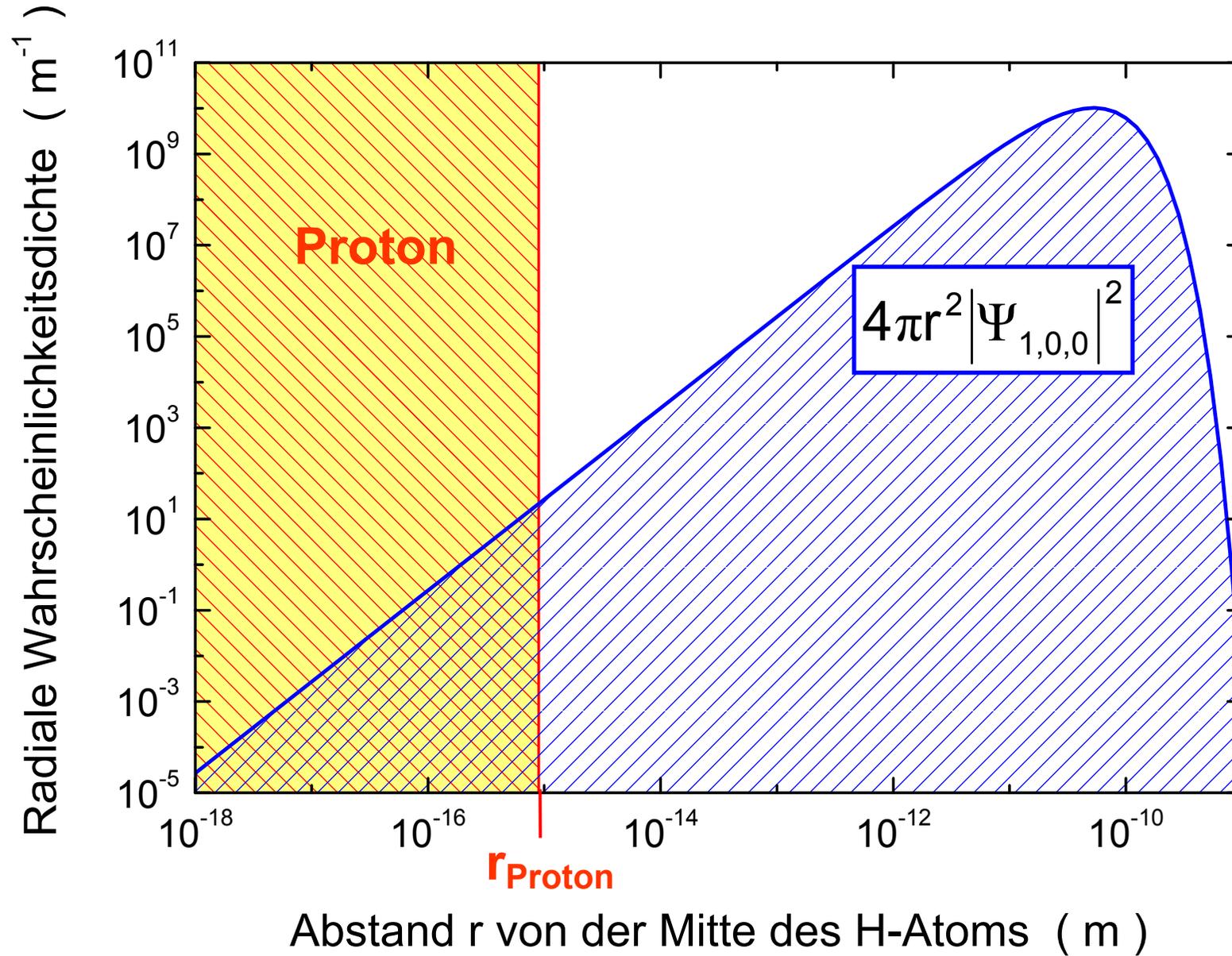
Wahrscheinlichkeitsdichte des e⁻ am Kernort

Elektron im Grundzustand des Wasserstoffatoms: n=1, l=0, m=0



Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron an einem beliebigen Ort im Kern anzutreffen, ist praktisch konstant

Elektron im H-Atom und Ausdehnung des Protons



Aufenthaltswahrscheinlichkeit des e^- im Kern

Radius des Protons: $r_p = 0.895(18) \text{ fm}$

Bohrscher Radius: $a_0 = 0.529 \cdot 10^5 \text{ fm}$

Elektron im Grundzustand des Wasserstoffatoms: $n=1, l=0, m=0$

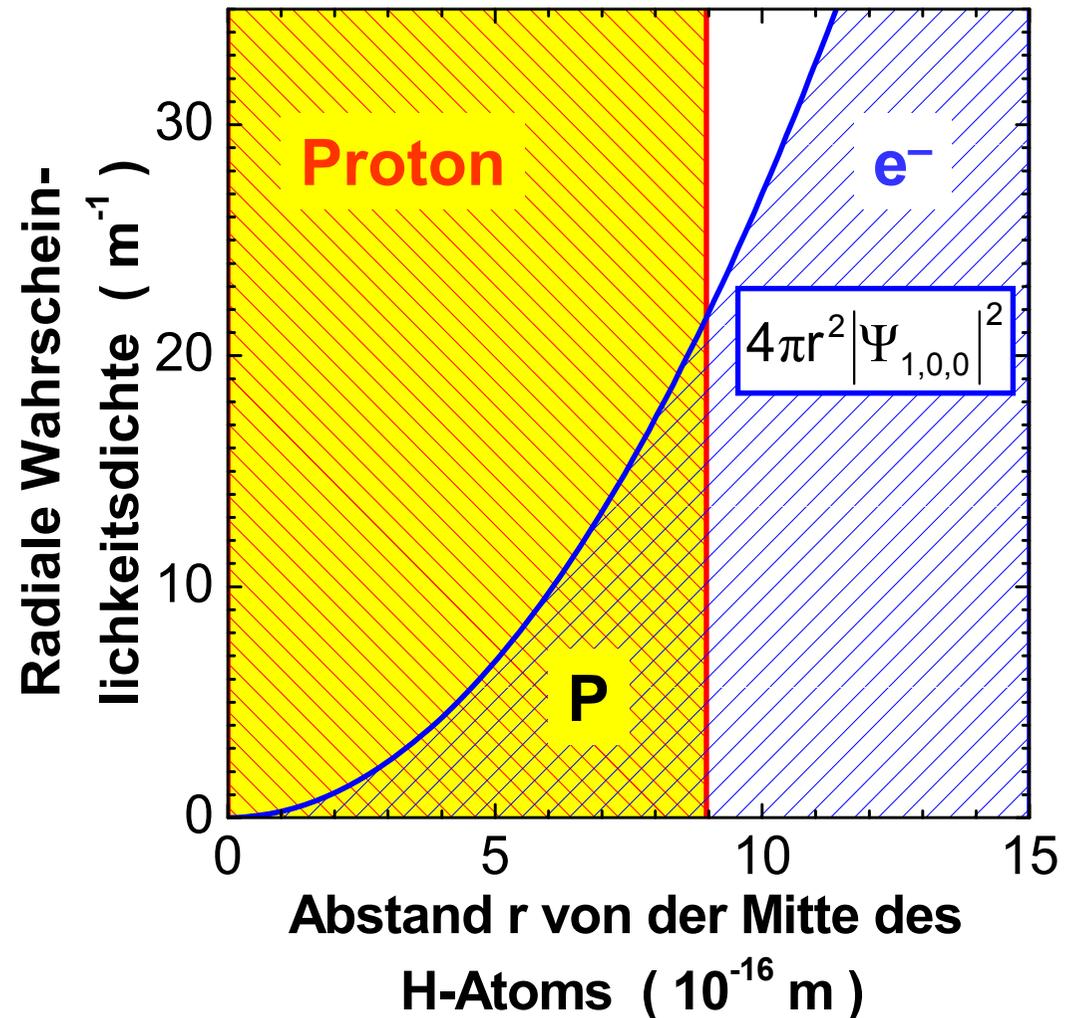
$$P = \int_0^{r_p} 4\pi r^2 |\Psi_{1,0,0}|^2 dr$$

$$= \int_0^{r_p} \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0} dr$$

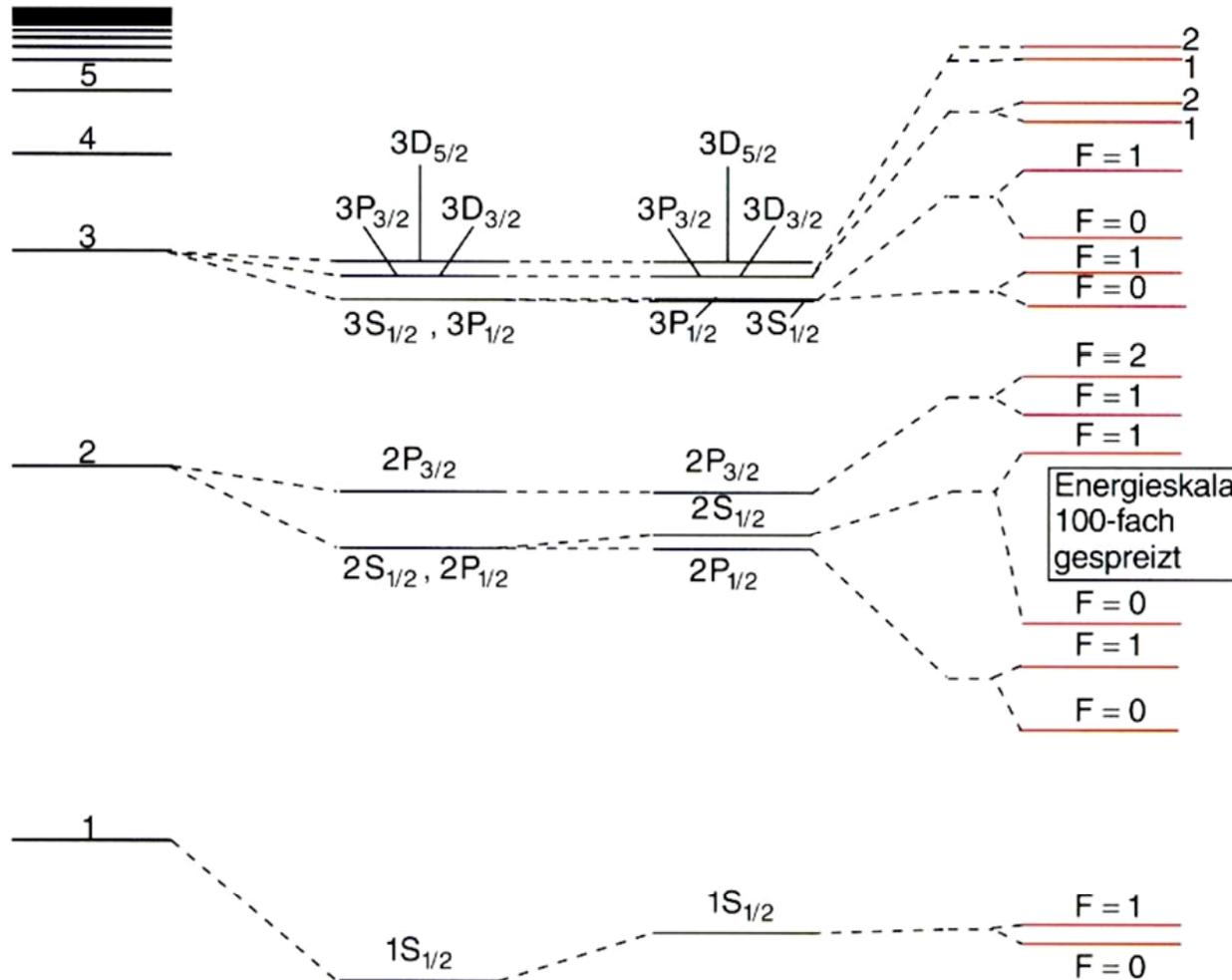
$$= \frac{1}{2} \int_0^{2r_p/a_0} x^2 e^{-x} dx$$

$$\approx \frac{1}{2} \frac{x^3}{3} \Big|_0^{2r_p/a_0}$$

$$\approx 6.5 \cdot 10^{-15}$$



Vollständiges Termschema des H-Atoms



Wechselwirkungen zwischen Atomhülle und Atomkern;
 Modifikation des Coulompotenzials, WW der Spins bzw. deren magnetische Momente

Bohrsche Energieniveaus

≙ Schrödinger-gleichung ohne Spin

Feinstruktur nach Dirac

≙ $\vec{l} \cdot \vec{s}$ -Kopplung + relat. Massenzunahme

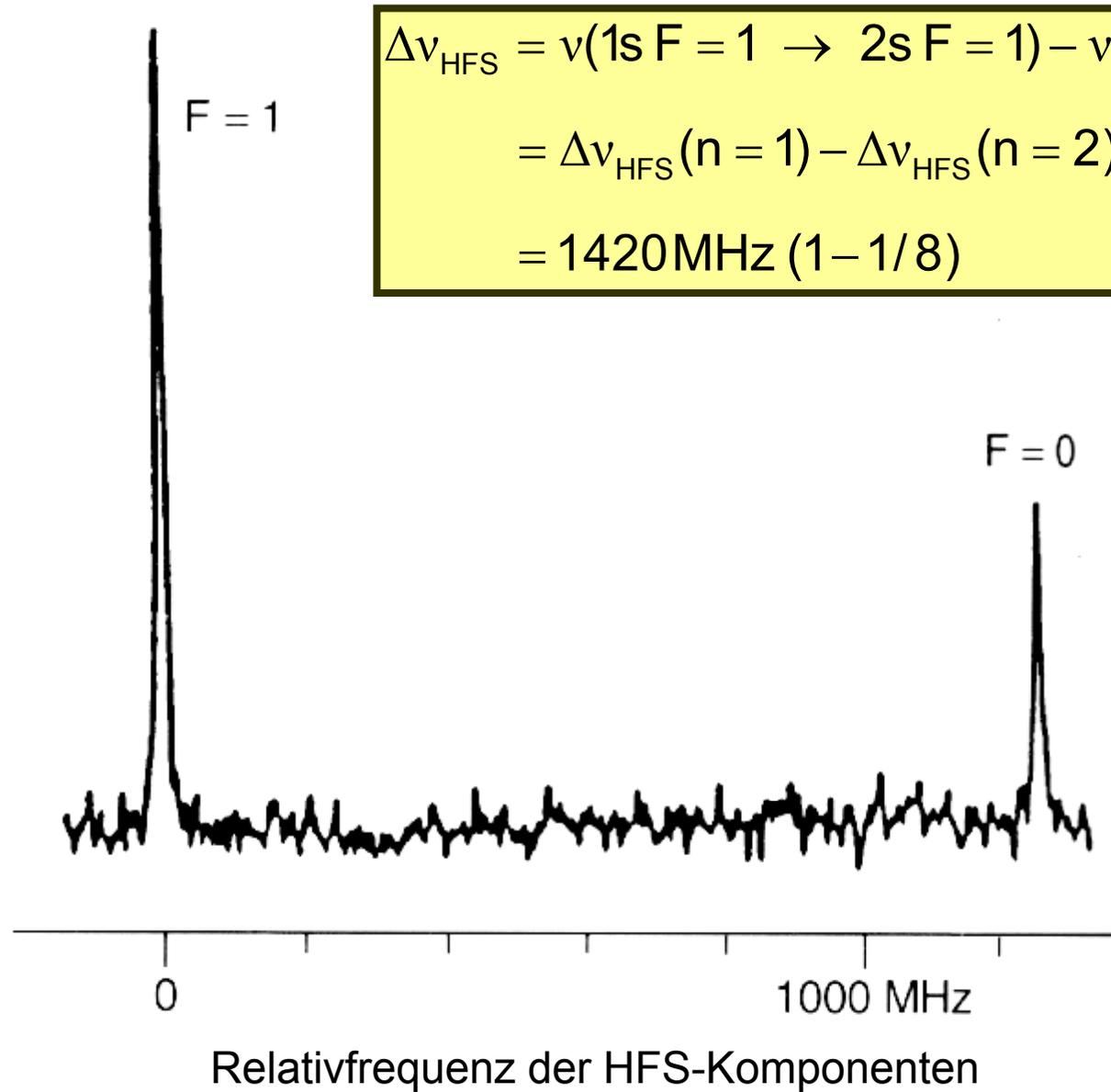
Lamb-Verschiebung

≙ Strahlungskorrektur (QED)

Hyperfeinstruktur

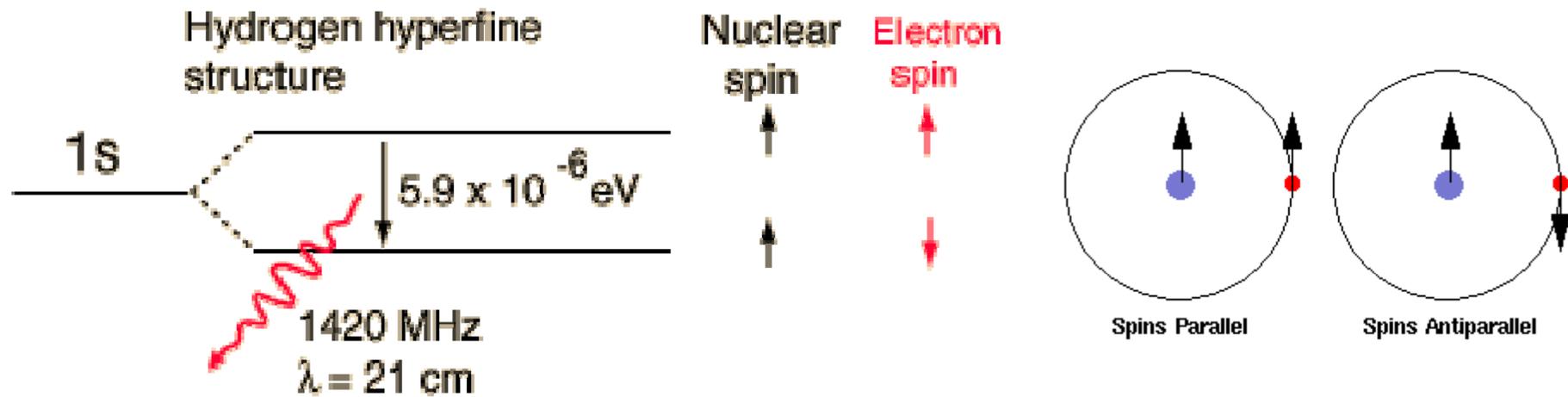
≙ Kerneffekte

Hyperfeinstruktur des 1s-2s Übergangs im H-Atom



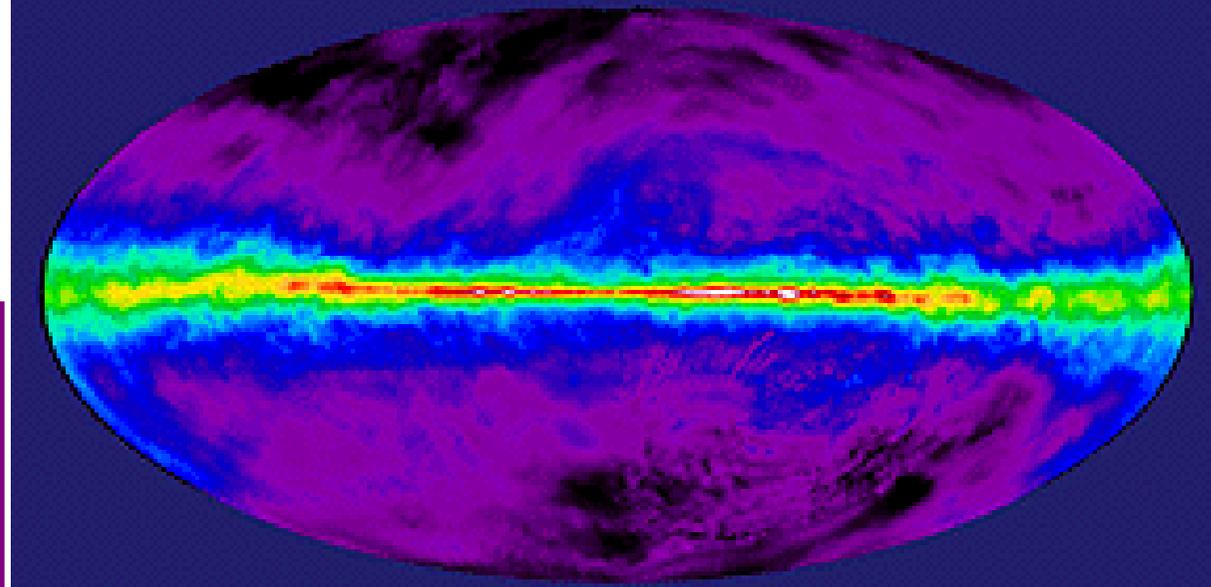
$$\begin{aligned}\Delta\nu_{\text{HFS}} &= \nu(1s F = 1 \rightarrow 2s F = 1) - \nu(1s F = 0 \rightarrow 2s F = 0) \\ &= \Delta\nu_{\text{HFS}}(n = 1) - \Delta\nu_{\text{HFS}}(n = 2) \\ &= 1420\text{MHz} (1 - 1/8)\end{aligned}$$

Grundzustand des H-Atoms



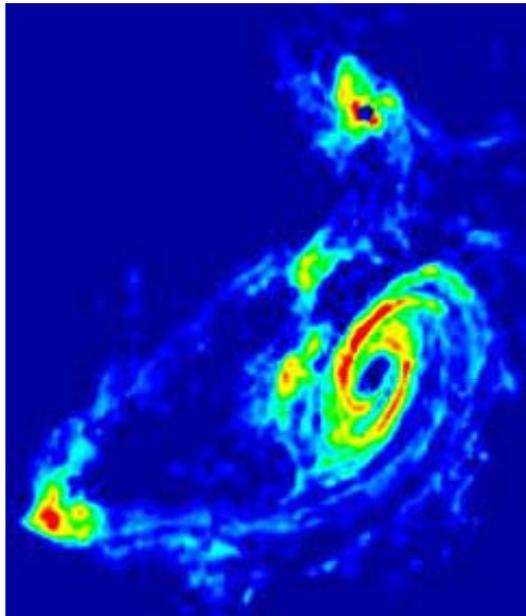
Atomic Hydrogen

21 cm Dickey-Lockman

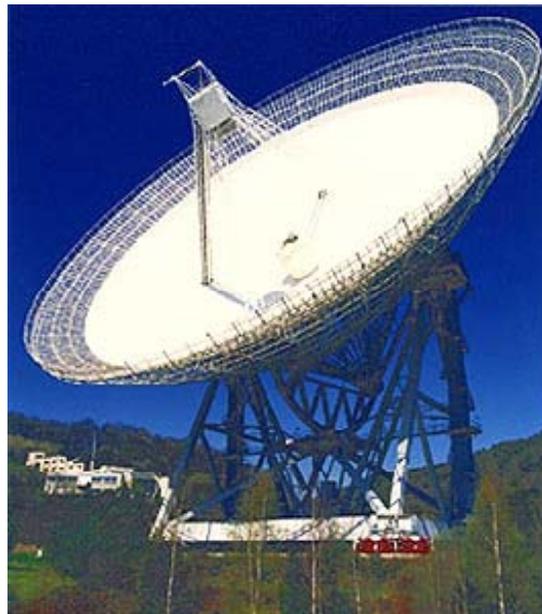


Aufnahme der
galaktischen Ebene im
Licht der 21 cm Linie
des Wasserstoffs

21 cm Radioastronomie

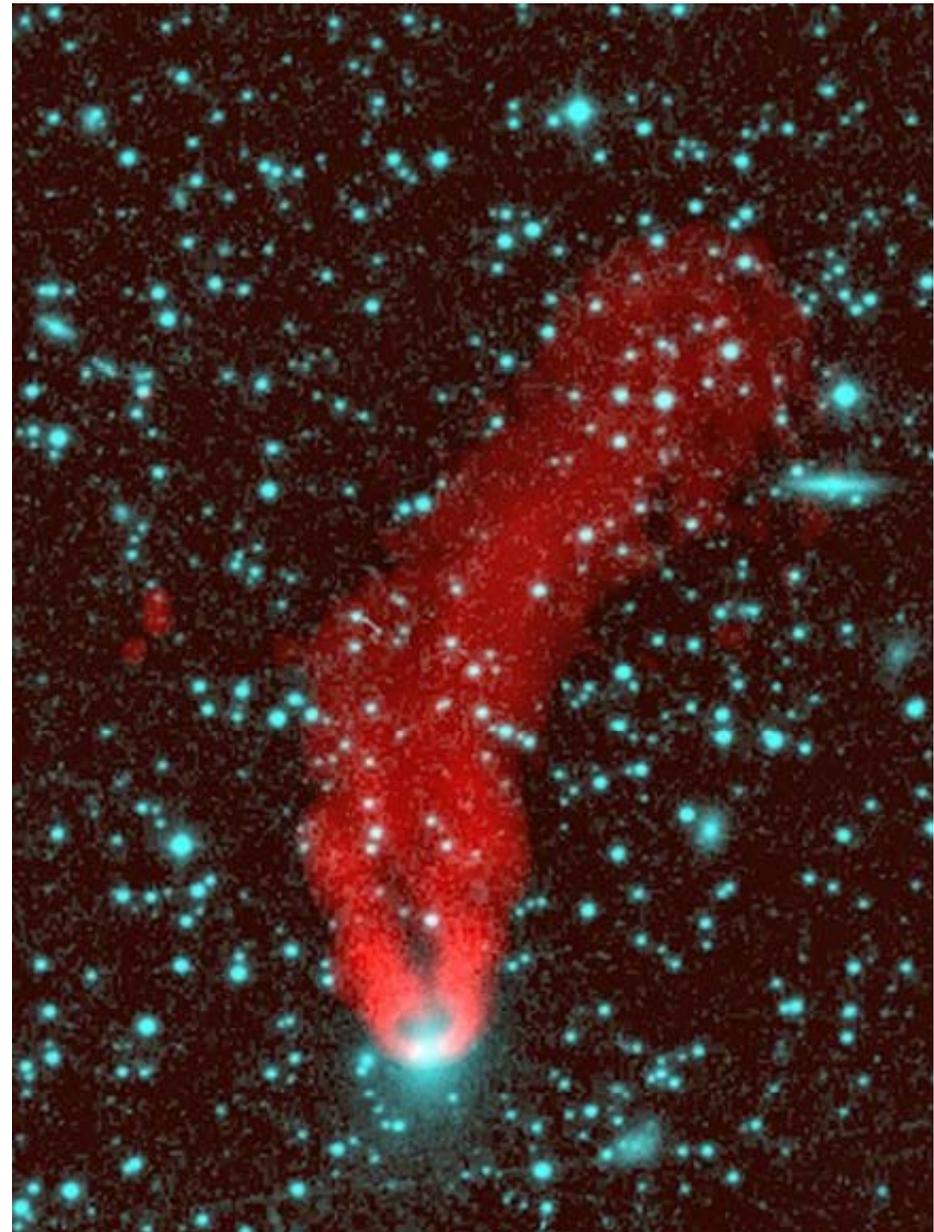


**M81
Galaxien-
Gruppe**



**Effelsberg:
größtes
schwenkbares
Radioteleskop
der Welt**

Radio Galaxy 3C83.1B



21 cm Strahlung: Signatur für atomaren Wasserstoff



**Centaurus A im 21 cm Licht -grün und rosa-
(überlagert mit einem optischen Bild und einem Röntgen Bild -blau)**



**Very Large Array (VLA)
Socorro, New Mexico**

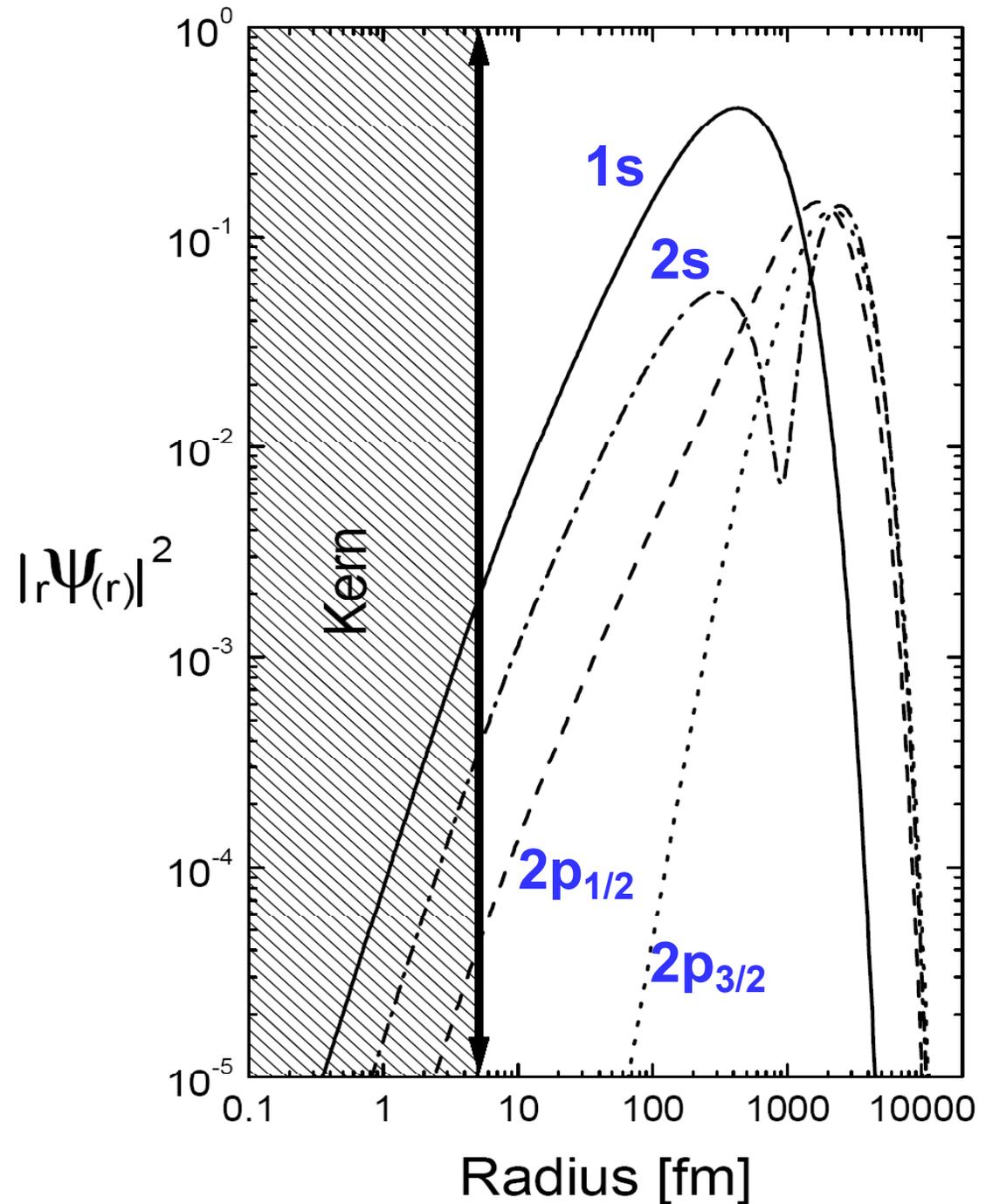
Wellenfunktionen des U^{91+} \leftrightarrow Ausdehnung des Uran-Kerns

1s Elektron

hält sich mit einiger
Wahrscheinlichkeit im
Atomkern auf;

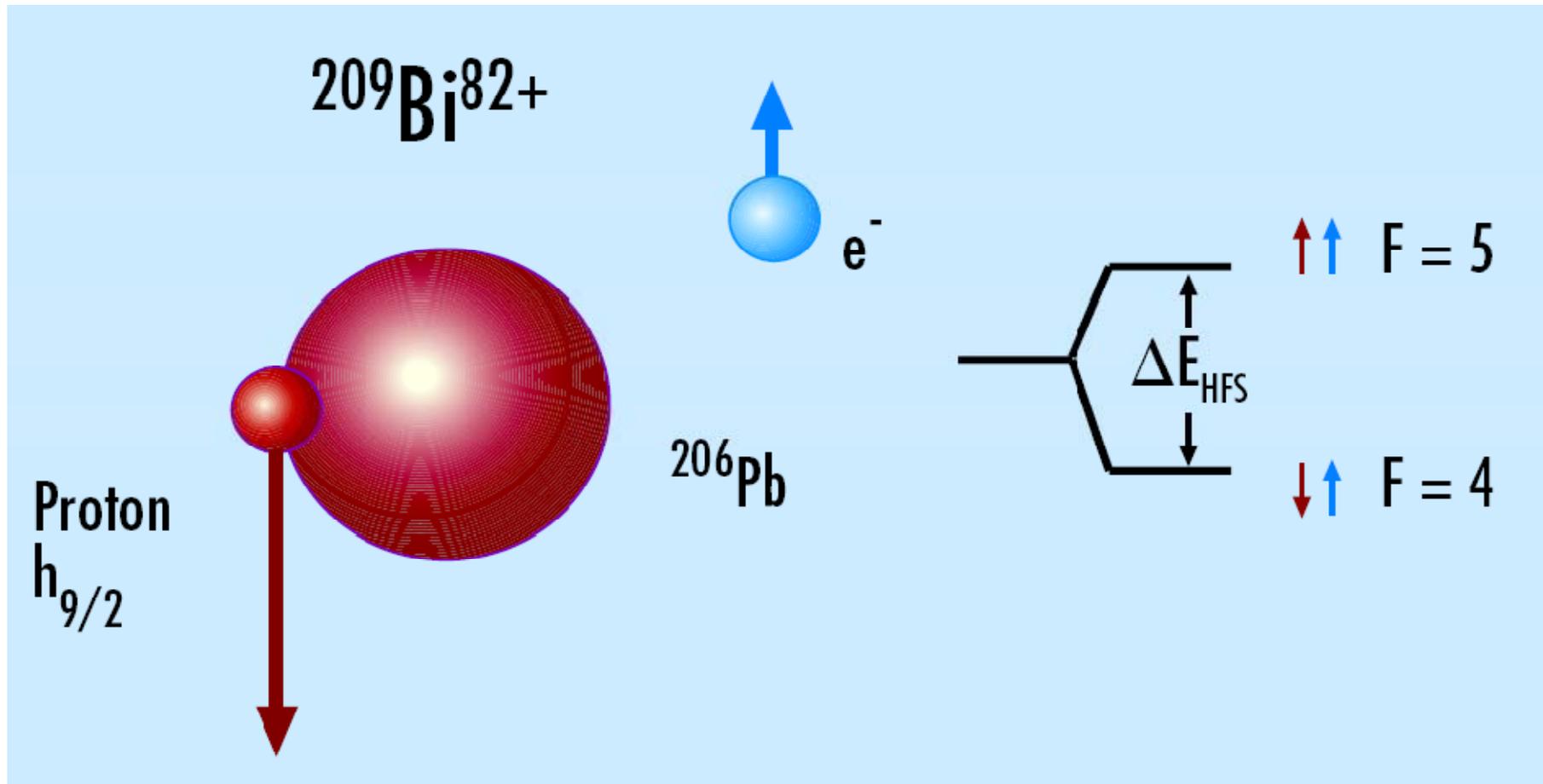
wirkt damit wie eine
Mess-Sonde für
Kerneigenschaften

→ Hyperfeineffekte



Hyperfeinstruktur in Bi^{82+}

Das magnetische Moment des Bi-209 Kerns wird wesentlich durch das äußerste **Proton in der $1h_{9/2}$ Schale** des Kerns bestimmt – es ist entsprechend der Wellenfunktion dieses Protons im äußeren Bereich des Kerns konzentriert. Dies führt zu einer merklichen **Verschiebung der HFS Energie**. (Bohr-Weisskopf Effekt)



Bestimmung der HFS-Aufspaltung in Bi^{82+} und Pb^{81+}

30 ns Pulse vom Farbstofflaser, Wellenlänge wird durchgestimmt

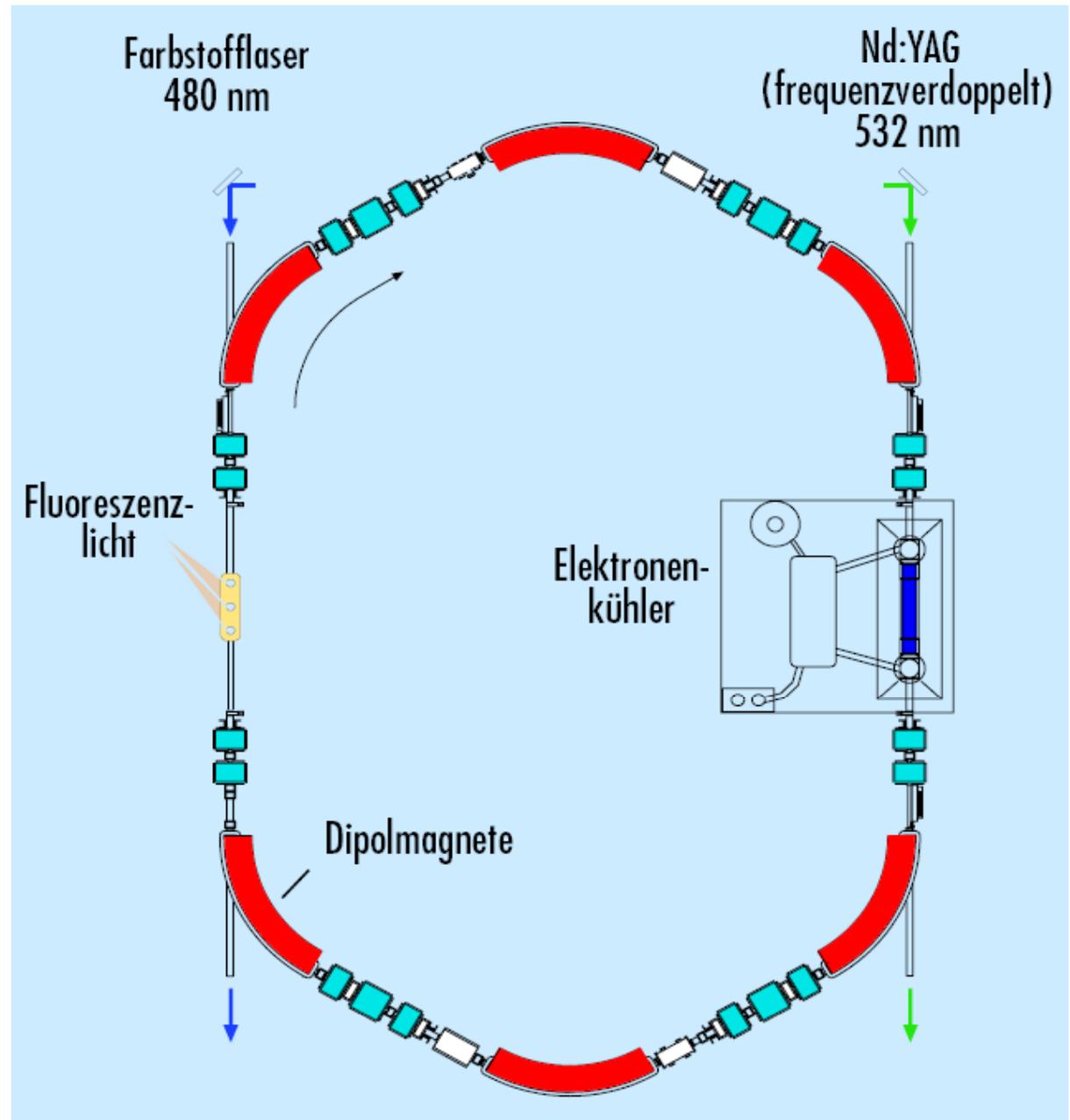
Bi^{82+} Ionen kreisen im Ring mit $v=\beta c=0.58666c$

Fluoreszenzsignal wird mit 3 Photovervielfachern registriert

Resonanz beobachtet bei $\lambda_{\text{Lab}}=477.794 \text{ nm}$

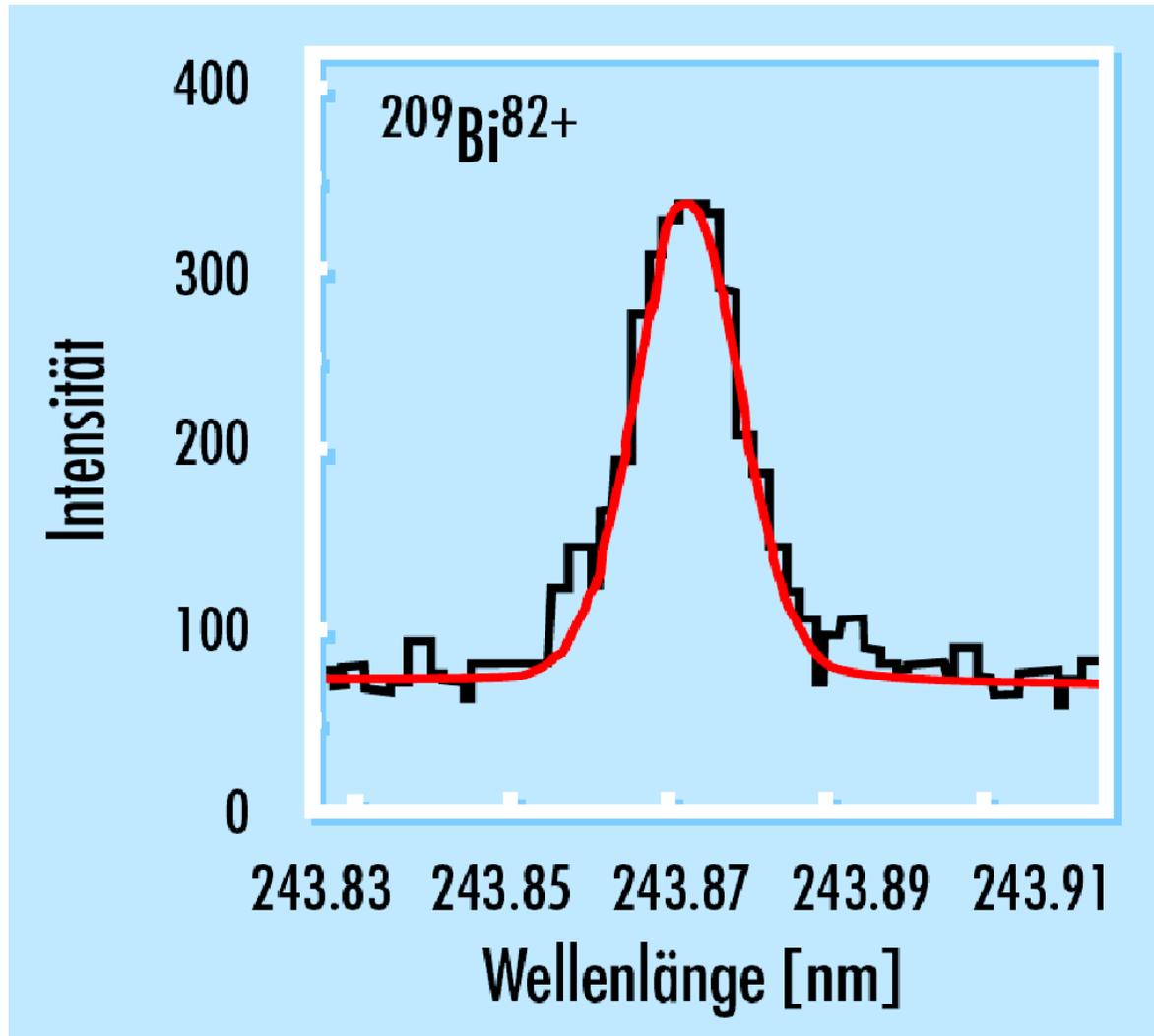
Dopplerverschiebung der Laserwellenlänge auf

$$\lambda = \lambda_{\text{Lab}} \sqrt{\frac{1-\beta}{1+\beta}} = 243.87 \text{ nm}$$



I. Kluft et al., Phys. Rev. Lett. 73, 2425 (1994)

Doppler-korrigiertes Fluoreszenzsignal: Hyperfein-Übergang in H-ähnlichem Wismuth



Energieverschiebung als Folge der Kernausdehnung

Das Coulomb-Potenzial $U(r)$ eines ausgedehnten Kerns unterscheidet sich vom Coulomb-Potenzial $Ze/(4\pi\epsilon_0 \cdot r)$ einer punktförmigen Ladung. Entsprechend kommt es zu einem Unterschied in der Bindungsenergie:

$$\Delta E = \int \left[U(r) - \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 \cdot r} \right] \cdot \rho_{\text{el}}(\vec{r}) d^3r$$

Da die Elektronendichte über dem Kernvolumen konstant ist, ergibt sich

$$\Delta E = \rho_{\text{el}}(0) \int \left[U(r) - \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 \cdot r} \right] \cdot 4\pi r^2 dr$$
$$\propto \rho_{\text{el}}(0) \cdot \langle r^2 \rangle$$



ist der mittlere quadratische Ladungsradius des Kerns

Messung einer Energieverschiebung

Beispiel: Hyperfeinstruktur von Übergängen in Iridium

