

Атомная физика

Лекция 9

проф. Попов Александр Михайлович

Стационарная теория возмущений

Умеем решать

$$\hat{H}_0 \psi_n = E_n \psi_n$$

Надо решить

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}) \tilde{\psi}_n = \varepsilon_n \tilde{\psi}_n$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

Ищем решение в виде

$$\varepsilon_n = E_n + \delta E_n \quad \tilde{\psi}_n = \psi_n + \delta \psi_n$$

$$\delta E_n = \int \psi_n^* \hat{V} \psi_n d\tau$$

$$\delta E_n = \langle \psi_n | \hat{V} | \psi_n \rangle \equiv \langle n | \hat{V} | n \rangle = V_{nn}$$

Для функции

$$\delta \psi_n = \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n - E_k} \psi_k$$

$$\tilde{\psi}_n = \psi_n + \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n - E_k} \psi_k + \dots$$

Условия применимости

$$V_{nn} \ll |E_n - E_k|$$

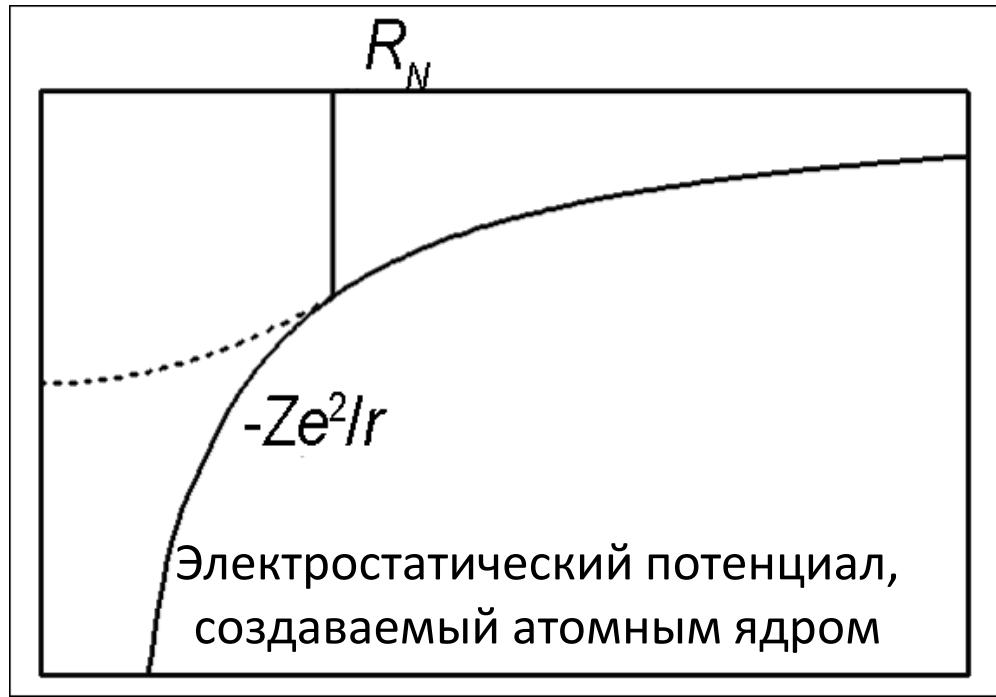
$$V_{kn} \ll |E_n - E_k|$$

Второй порядок ТВ

$$\delta E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} |V_{kn}|^2 / (E_n - E_k)$$

Стационарная теория возмущений II

Изотопическое смещение уровней, обусловленное конечным размером атомного ядра



$$\delta E_{ns} = \frac{4\pi}{6} e |\psi_{ns}(0)|^2 \int_{V_N} r^2 \rho(r) d^3 r = \frac{2\pi}{3} e |\psi_{ns}(0)|^2 Z e \bar{R}^2$$

$$|\psi_{ns}(0)|^2 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3 n^3} \quad \bar{R}^2 = \frac{1}{Z e} \int r^2 \rho(r) d^3 r$$

Точечное ядро: $\hat{H}_0 = \hat{T} - \frac{Ze^2}{r}$

Неточечное ядро $\hat{H} = \hat{T} - e\varphi(\vec{r}) = \hat{H}_0 + \delta V$

Здесь электростатический потенциал φ удовлетворяет уравнению $\nabla^2 \varphi = -4\pi\rho(\vec{r})$

Возмущение $\delta V = \tilde{V}(\vec{r}) - V(r) = -e\varphi(\vec{r}) + Ze^2/r$

Поправка к энергии $\delta E_{nl} = \int |\psi_{nl}(\vec{r})|^2 \delta V(\vec{r}) d^3 r$

Поскольку $R_N \ll a_0/Z$ $\delta E_{nl} = -e |\psi_{nl}(0)|^2 \int_{V_N} (\varphi(r) - Ze/r) d^3 r$

Смещаются вверх по энергии только s -состояния

Релятивистские эффекты в атоме водорода

I) Релятивистская связь кинетической энергии и импульса

$$T = mc^2 \left(\sqrt{1 + (p/mc)^2} - 1 \right) = mc^2 \left(1 + \frac{1}{2} (p/mc)^2 - \frac{1}{8} (p/mc)^4 + \dots - 1 \right) \approx \frac{p^2}{2m} - \frac{(p^2/2m)^2}{2mc^2} \rightarrow \hat{T} = \hat{T}_0 - \hat{T}_0^2/2mc^2$$

$$\Delta E_T = \langle n\ell | \delta\hat{T} | n\ell \rangle = -\frac{1}{2mc^2} \langle n\ell | (H_0 + Ze^2/r)^2 | n\ell \rangle = -\frac{1}{2mc^2} (E_{n\ell}^2 + 2E_{n\ell} Ze^2 \langle 1/r \rangle + Z^2 e^4 \langle 1/r^2 \rangle)$$

$$E_{n\ell} = -Z^2 Ry/n^2 \quad \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \int R_{n\ell}^2(r) r dr = \frac{Z}{n^2 a_0} \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \int R_{n\ell}^2(r) dr = \frac{Z^2}{n^3 a_0^2 (\ell + 1/2)}$$

$$\Delta E_T = \frac{\alpha^2 Z^2}{n} E_{n\ell} \left(\frac{1}{\ell + 1/2} - \frac{3}{4n} \right)$$

Произошло снятие вырождения по орбитальному моменту

II) Спин-орбитальное взаимодействие

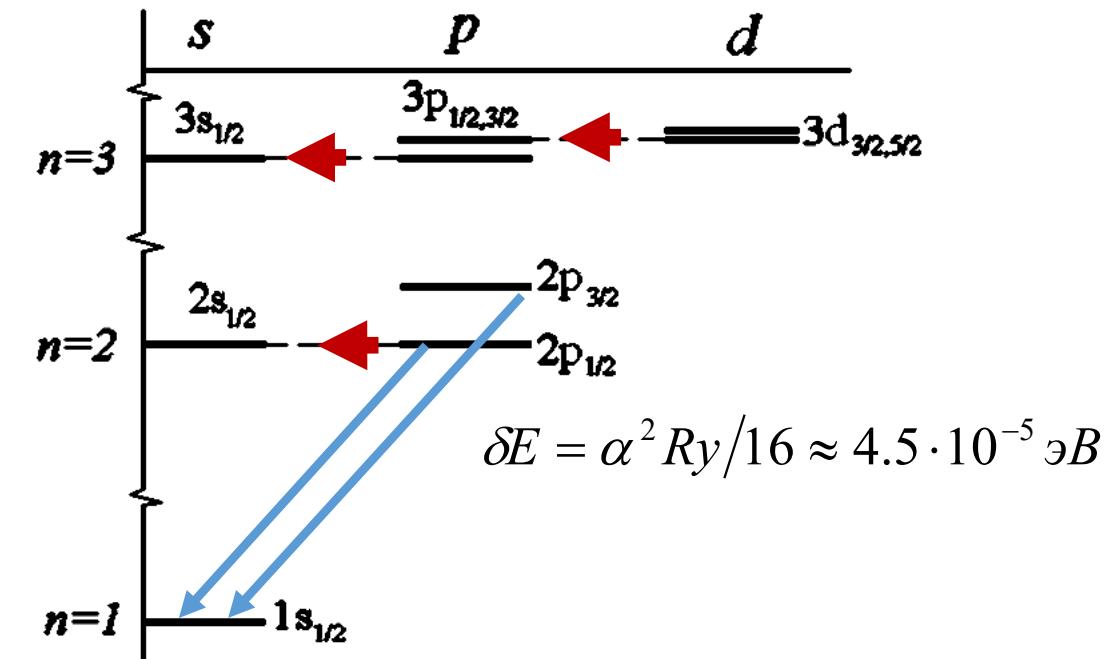
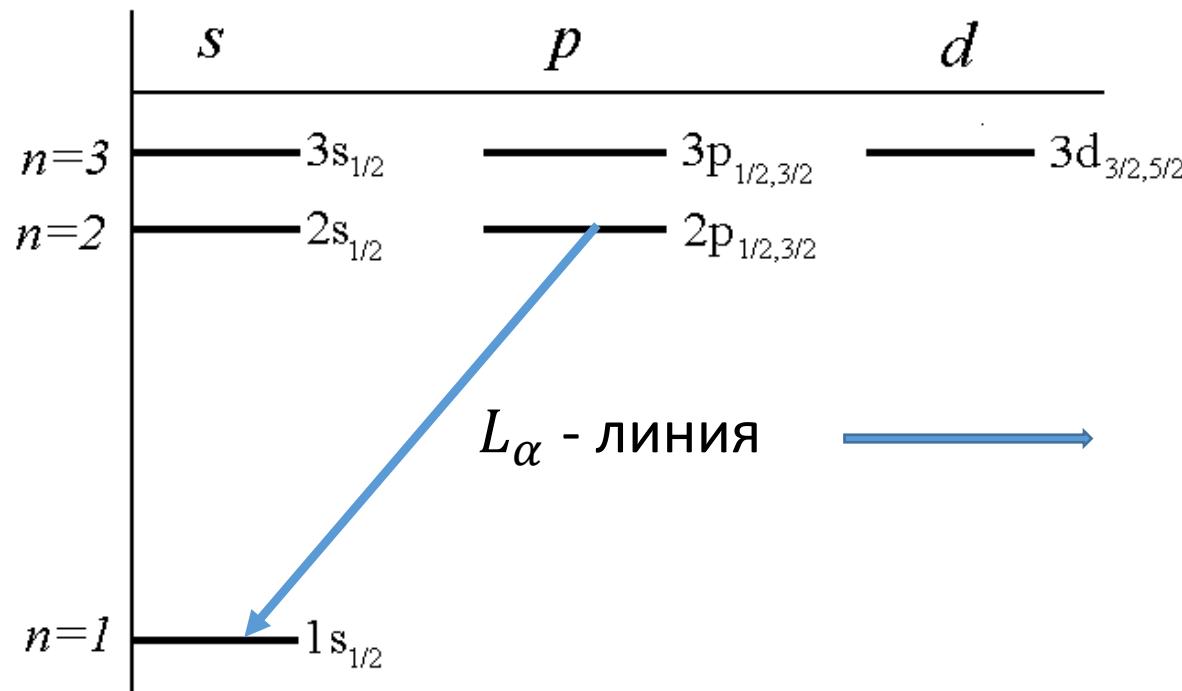
$$\hat{V}_{\ell s} = 2\mu_B^2 \frac{Z}{r^3} \left(\hat{\ell}, \hat{s} \right) = 2\mu_B^2 \frac{Z}{r^3} \frac{(\hat{j}^2 - \hat{\ell}^2 - \hat{s}^2)}{2}$$
$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \int \frac{1}{r} R_{nl}^2(r) dr = \frac{Z^3}{n^3 a_0^3 \ell (\ell + 1) (\ell + 1/2)}$$

Тут существенно, что работаем в базисе n, ℓ, j, m_j

$$\Delta E_{\ell s} = Z\mu_B^2 \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle (j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1))$$

Тонкая структура спектра атома водорода. Формула Дирака

$$\Delta E_{n\ell} = \Delta E_T + \Delta E_{\ell s} = -\frac{\alpha^2 Z^4 Ry}{n^3} \left(\frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right)$$

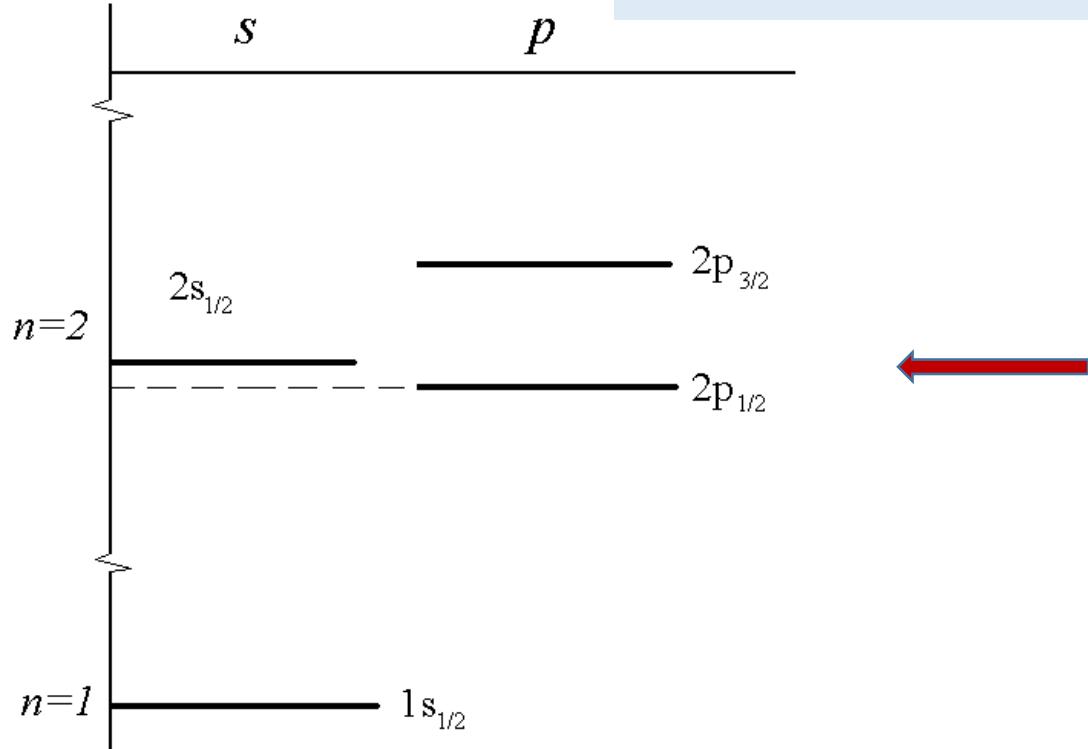


Вырождение снимается не полностью!

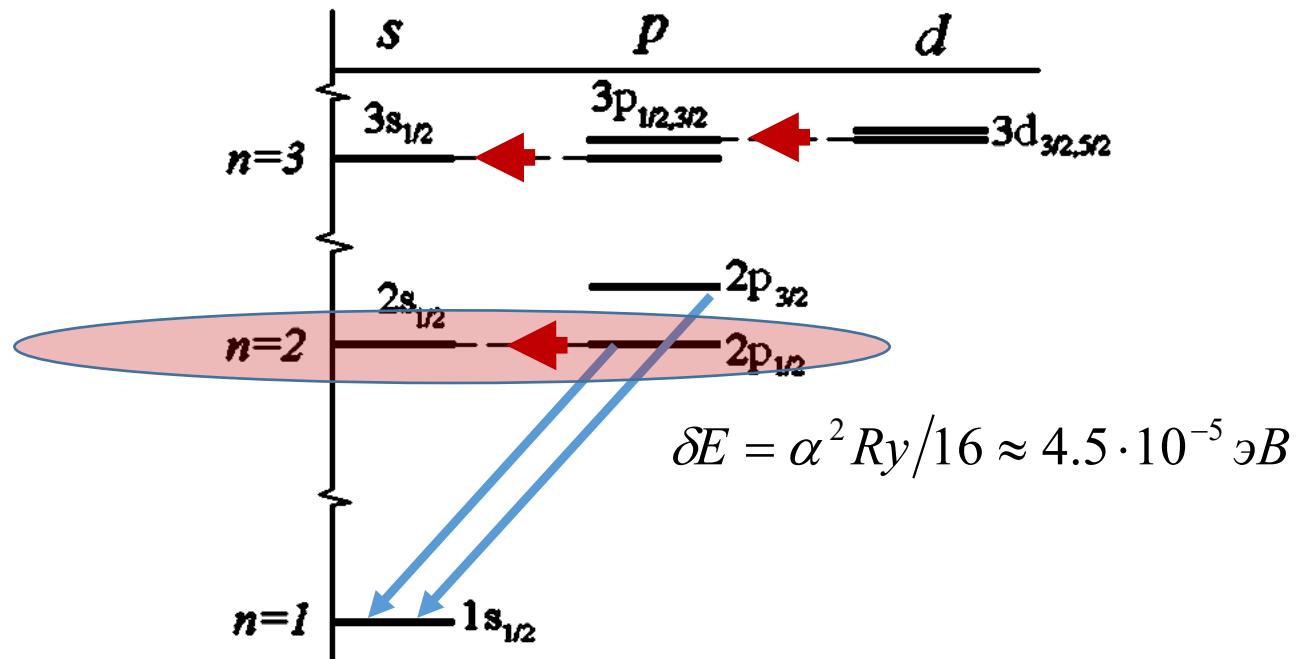
$$\delta E = \Delta E_{n\ell}(j = \ell + 1/2) - \Delta E_{n\ell}(j = \ell - 1/2) = \frac{\alpha^2 Z^4 Ry}{n^3 \ell(\ell + 1)}$$

Тонкая структура спектра атома водорода. Формула Дирака (что не учено??)

$$\Delta E_{n\ell} = \Delta E_T + \Delta E_{\ell s} = -\frac{\alpha^2 Z^4 Ry}{n^3} \left(\frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right)$$



Лэмбовский сдвиг, (1948)



$$\delta E = \Delta E_{n\ell}(j = \ell + 1/2) - \Delta E_{n\ell}(j = \ell - 1/2) = \frac{\alpha^2 Z^4 Ry}{n^3 \ell(\ell + 1)}$$

Понятие о тонкой структуре многоэлектронных атомов

В отличие от атома водорода, где для расчета тонкой структуры надо принимать во внимание спин – орбитальное взаимодействие и релятивистскую связь импульса и энергии, в многоэлектронных атомах **тонкая структура спектра обусловлена только спин – орбитальным взаимодействием в атоме**. Это связано с отсутствием «случайного» вырождения в спектрах многоэлектронных атомов. Действительно, рассмотренная нами первая релятивистская поправка лишь слегка смещает положение уровня, но не приводит к его расщеплению.

$$V \sim (\vec{L}, \vec{S}) \quad \vec{j} = \vec{L} + \vec{S}$$

Число компонент тонкой структуры (компонент мультиплета) – число возможных значений вектора \vec{j} (число взаимных ориентаций \vec{L} и \vec{S})

Понятие о сверхтонкой структуре атомных спектров

Спин ядра и связанный с ним магнитный момент

Нуклоны $I_p = I_n = 1/2$

водород $I_H = I_p = 1/2$

дейтерий $I_D = 1$

Магнитный момент протона и нейтрона

$$\vec{\mu}_N = g_N \mu_{NB} \vec{I}_n$$

$\mu_{NB} = e\hbar/2m_p c$ - ядерный магнетон

g – факторы: $g_p \approx 5.58$

$g_n \approx -3.82$

$$\mu_{p_z} = 2.79 \mu_{NB}$$

$$\mu_{n_z} = -1.91 \mu_{NB}$$

Энергия взаимодействия

$$\delta E \sim \frac{\mu_B \mu_{NB}}{a_0^3} \sim \frac{m}{m_p} \alpha^2 Ry \sim 10^{-6} \text{ эВ}$$

Сверхтонкая структура основного состояния
атома водорода $1s_{1/2}$ ($\lambda = 21 \text{ см}$)

$$\vec{F} = \vec{I}_p + \vec{s} \rightarrow F = 0, 1 - \text{спины (анти)параллельны}$$