Атомная физика

Лекция 15

проф. Попов Александр Михайлович

Правила отбора в многоэлектронном атоме

Одноэлектронный атом (атом с единственным электроном сверх полностью заполненных оболочек и подоболочек)

Δn- любое $\qquad \Delta\ell = \pm 1 \qquad \Delta m_\ell = 0, \pm 1 \qquad \Delta m_s = 0$

Два базиса $n, \ell, m_\ell, m_s \quad \leftrightarrow n, \ell, j, m_j$

$\Delta m_j = 0, \pm 1 \qquad \Delta j = 0, \pm 1$

Многоэлектронный атом в приближении самосогласованного поля $\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2)$

$$D_{fi} = -e\int \psi_f^*(\xi_1, \xi_2)(\xi_1 + \xi_2)\psi_i(\xi_1, \xi_2)d\xi_1 d\xi_2 =$$

$$-e\int \psi_{f1}^*(\xi_1)\underbrace{\psi_{f2}^*(\xi_2)\xi_1\psi_{i1}(\xi_1)\psi_{i2}^*(\xi_2)}_{f2=i2}d\xi_1 d\xi_2 - e\int \underbrace{\psi_{f1}^*(\xi_1)\psi_{f2}^*(\xi_2)\xi_2\psi_{i1}(\xi_1)}_{f1=i1}\psi_{i2}^*(\xi_2)d\xi_1 d\xi_2 =$$

$$-e\int \psi_{f1}^*(\xi_1)\xi_1\psi_{i1}(\xi_1)d\xi_1 - e\int \psi_{f2}^*(\xi_2)\xi_2\psi_{i2}^*(\xi_2)d\xi_2 = d_{fi}(1) + d_{fi}(2)$$

Сумма одноэлектронных переходов

В многоэлектронном атоме возможны только одноэлектронные переходы (в приближении самосогласованного поля)

Одноэлектронные переходы в гелии

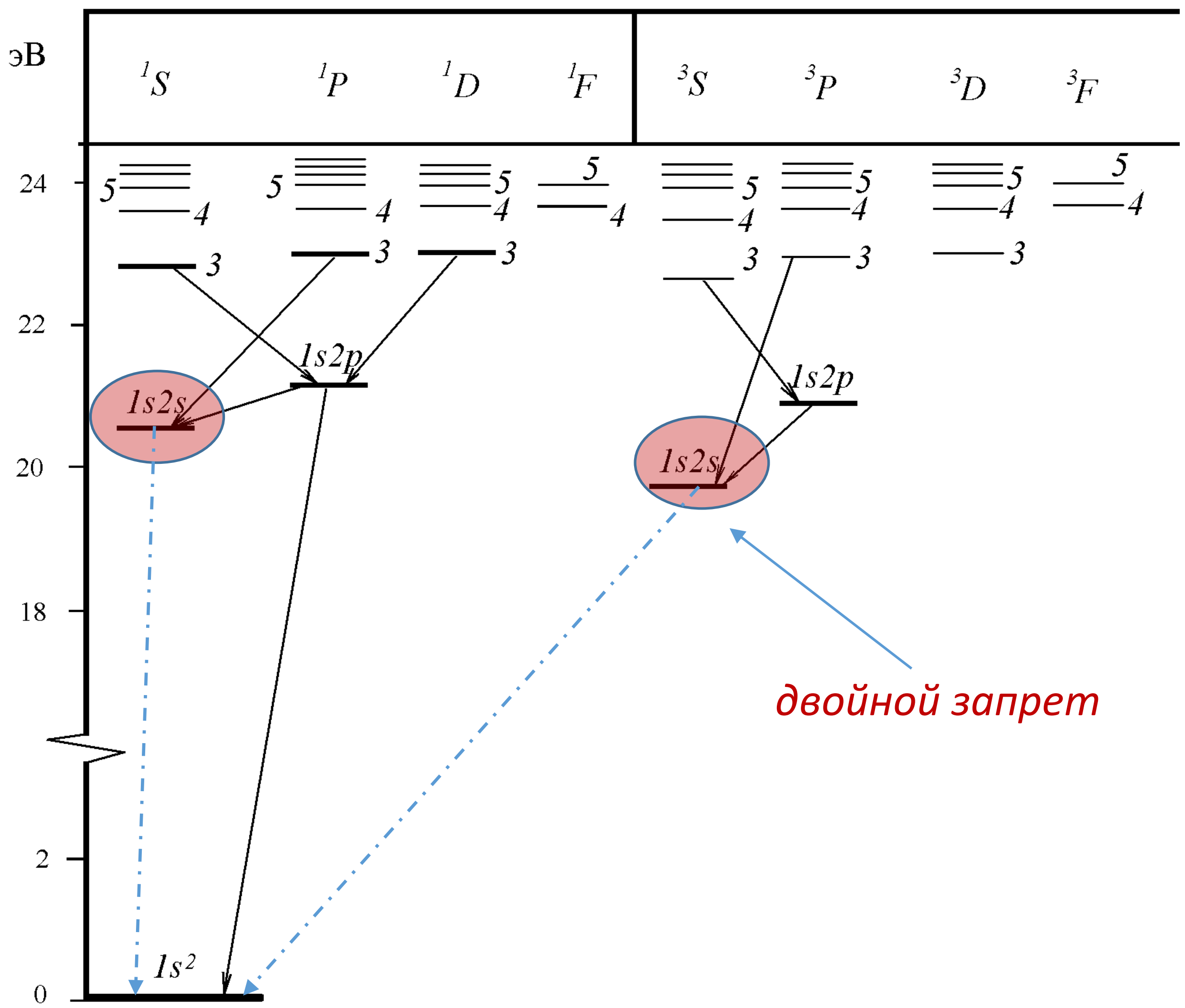
$$1sn\ell' \leftrightarrow 1sn\ell''$$

Орбитальный момент определяется состоянием возбужденного электрона

$\Delta\ell = \pm 1 \longrightarrow \Delta L = \pm 1$

$\Delta S = 0$ – запрет интеркомбинаций

Метастабильные состояния в атоме гелия



Правила отбора в многоэлектронном атоме

<u>Правило Лапорта</u> - правило отбора по четности (переход между конфигурациями)

$P = (-1)^{\ell}$ $\Delta\ell = \pm 1$ $\longrightarrow$ $P = (-1)^{\sum \ell_i}$ $\Delta(\sum \ell_i) = \pm 1$

Четность задается конфигурацией

Пример (**атом углерода**): $2p^2$ - четная: возможные термы: ${}^1SD,\ {}^3P$

$2p3s$ – нечетная: ${}^1P,\ {}^3P$

$2p3p$ – четная: ${}^1SPD,\ {}^3SPD$

$2p3d$ - нечетная: ${}^1PDF,\ {}^3PDF$

${}^3P^o$ --- “o” – odd - нечетный

Переходы между термами одной конфигурации запрещены правилом Лапорта

<u>Переход между термами</u> разных конфигураций $\Delta L = 0, \pm 1$, $\Delta S = 0$ (запрет интеркомбинаций)

$2p^2\ {}^3P \rightarrow 2p3s\ {}^3P$

$2p^2\ {}^3P \rightarrow 2p3d\ {}^3PD$

<u>Переход между состояниями термов</u> $\Delta J = 0, \pm 1$

$2p^2\ {}^3P_0 \rightarrow 2p3s\ {}^3P_{0,1}$ $2p^2\ {}^3P_1 \rightarrow 2p3s\ {}^3P_{0,1,2}$ $2p^2\ {}^3P_2 \rightarrow 2p3s\ {}^3P_{1,2}$

Всего 6 линий

Запрещены $J = 0 \rightarrow J = 0$ переход

Атом в магнитном поле

критическое поле

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \cancel{\hat{V}_{LS}} + \hat{V}_M \qquad \hat{V}_{LS} = A(\hat{\vec{L}}\hat{\vec{S}}) \qquad V_{LS} \sim \alpha^2 Ry \qquad V_M \sim \mu_B \mathrm{H} \qquad \mathrm{H}^* \sim \frac{\alpha^2 Ry}{\mu_B}$$

Сильное поле $\hat{V}_M > \hat{V}_{LS}$

оператор взаимодействия

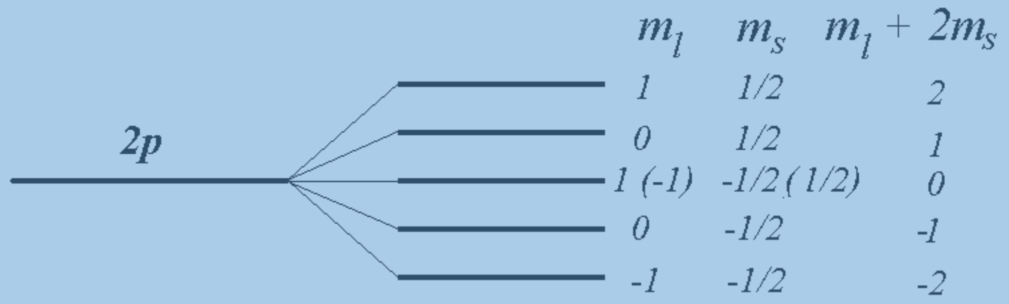
$$V_M = -\left(\vec{\mu}\vec{\mathrm{H}}\right) = -\left(\vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S, \vec{\mathrm{H}}\right) \qquad \vec{\mu}_L = -\mu_B \vec{L} \qquad \vec{\mu}_S = -2\mu_B \vec{S} \qquad \hat{V}_M = \mu_B \mathrm{H}(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)$$

Поправка к энергии по теории возмущений
(в базисе $\left|LM_L SM_S\right\rangle$)

$$\Delta E = \langle LM_L SM_S | \hat{V}_M | LM_L SM_S \rangle = \mu_B \mathrm{H}(M_L + 2M_S).$$

Число возможных значений $M_L + 2M_S$
определяет количество компонент расщепления

пример



$2p$ – состояние в атоме водорода

Атом в магнитном поле II

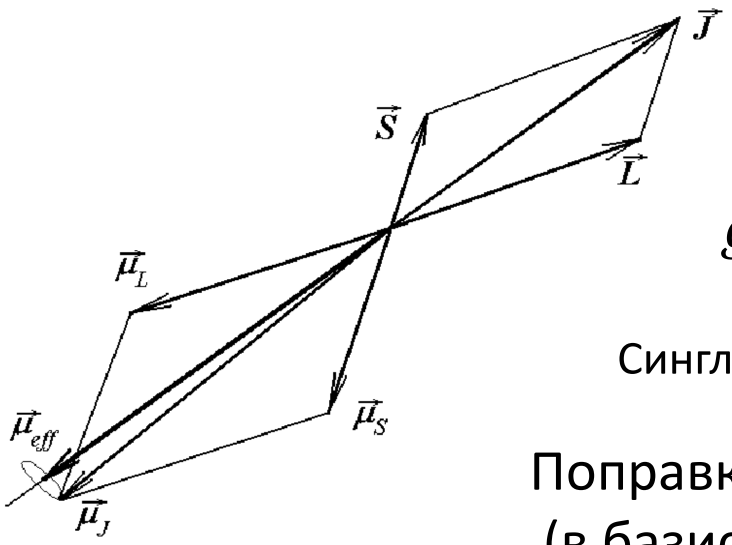
критическое поле

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{LS} + \hat{V}_M \qquad \hat{V}_{LS} = A(\hat{\vec{L}}\hat{\vec{S}}) \qquad V_{LS} \sim \alpha^2 Ry \qquad V_M \sim \mu_B \mathrm{H} \qquad \mathrm{H}^* \sim \frac{\alpha^2 Ry}{\mu_B}$$

Слабое поле $\hat{V}_M < \hat{V}_{LS}$ - должны учесть все слагаемые в гамильтониане

оператор взаимодействия

$$\vec{\mu}_L = -\mu_B \vec{L} \qquad \vec{\mu}_S = -2\mu_B \vec{S} \qquad \vec{\mu}_{eff} = -g\mu_B \vec{J} \qquad \hat{V}_M = g\mu_B \mathrm{H}\hat{J}_z$$



$$g = -\frac{1}{\mu_B}\frac{\left(\vec{\mu}_{eff}\vec{J}\right)}{\vec{J}^2} = -\frac{1}{\mu_B}\frac{\left(\vec{\mu}_J\vec{J}\right)}{\vec{J}^2} \qquad \vec{\mu}_J = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S = -\mu_B(\vec{L} + 2\vec{S}) = -\mu_B(\vec{J} + \vec{S})$$

g-фактор (фактор Ланде) $g = 1 + \dfrac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$

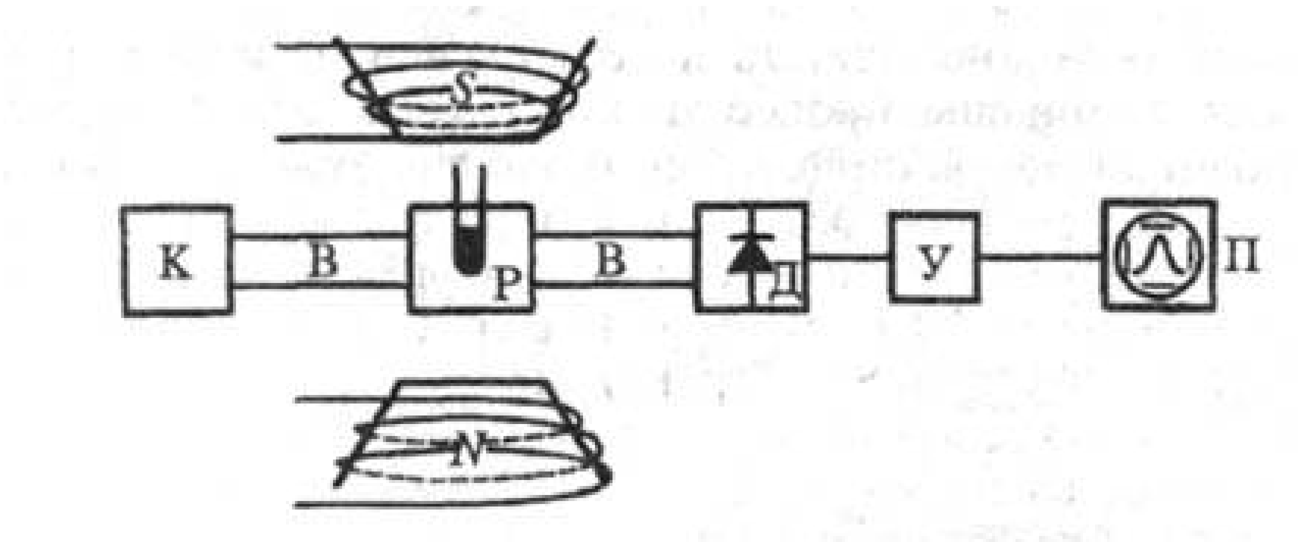
Синглеты ($S = 0$) – фактор Ланде $g = 1$, S – термы: $g = 2$ Но бывает, что $g = 0$

Поправка к энергии по теории возмущений (в базисе $\left|LSJM_J\right\rangle$)

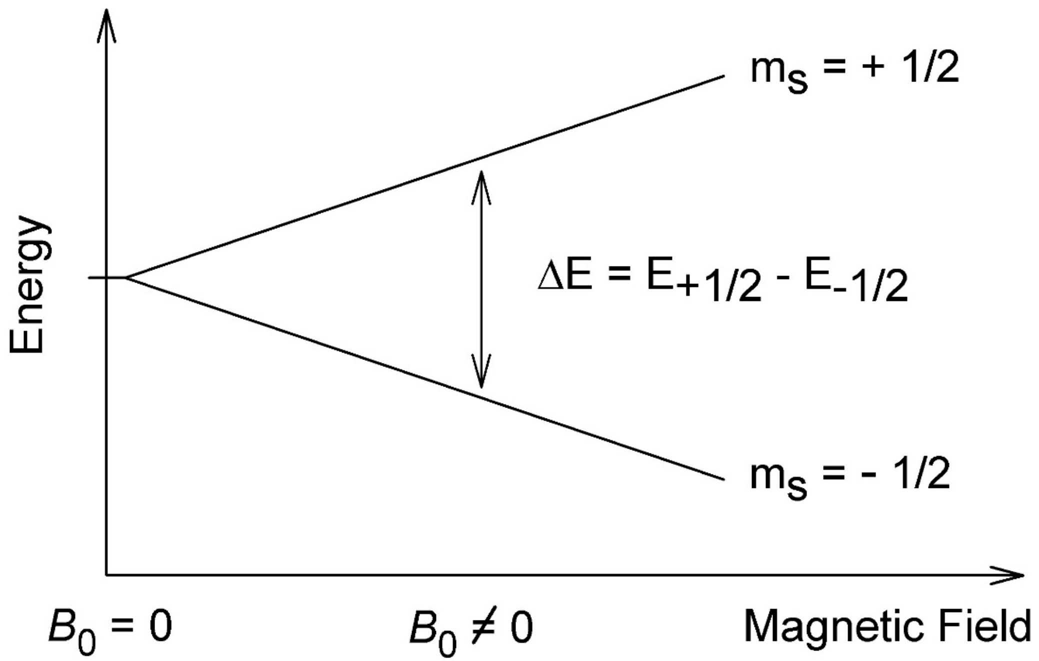
$$\Delta E = \left\langle LSJM_J\right|\hat{V}_M\left|LSJM_J\right\rangle = g\mu_B H M_J$$

Число компонент расщепления – $2J + 1$

Электронный парамагнитный резонанс (ЭПР), 1941



К - источник СВЧ излучения, В -волноводы, Р - объемный резонатор, Д - детектор СВЧ излучения, У - усилитель, NS - электромагнит, П - регистрирующее устройство.



$$\Delta E = g\mu_B \mathrm{H} \qquad \omega = g\frac{\mu_B \mathrm{H}}{\hbar} = g\frac{e\mathrm{H}}{2mc}$$

- в ответ не входит $\hbar$ – ответ можно понять классически

Классическая трактовка ЭПР – разворот вектора момента при совпадении частоты внешнего поля с частотой ларморовской прецессии

Эффект Зеемана (1896)

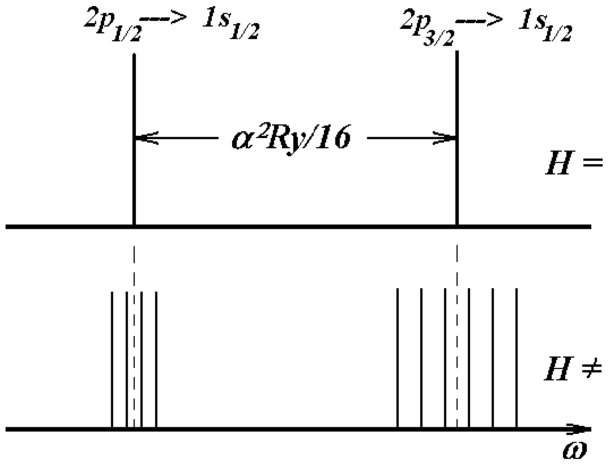
Аномальный эффект Зеемана

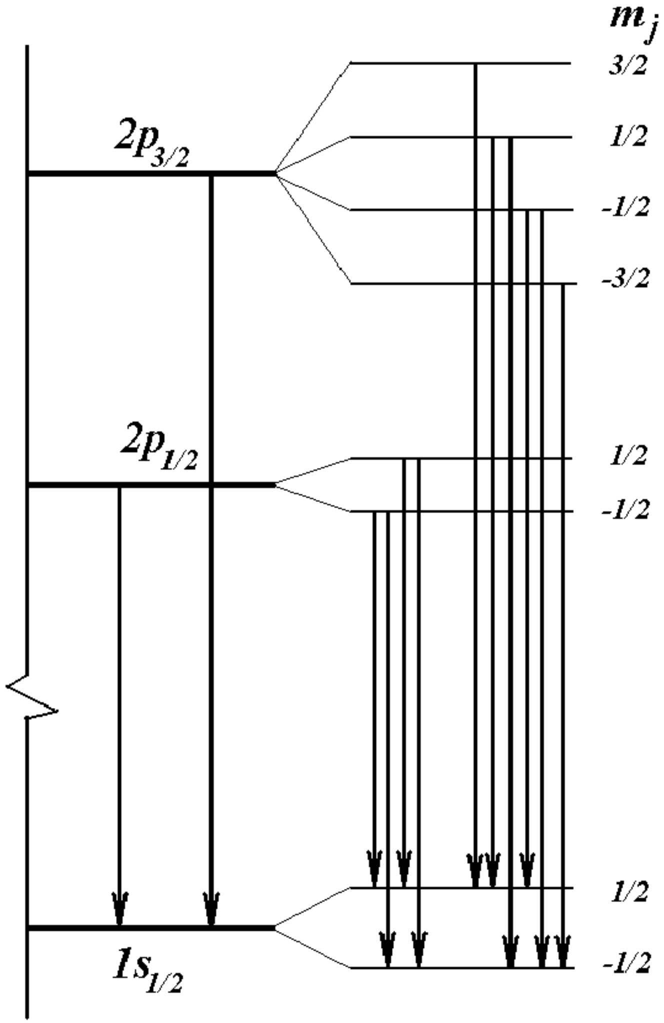
$$\omega_0 = (E_{02} - E_{01})/\hbar$$

$$E_1 = E_{01} + g_1 M_{J_1} \mu_B \mathrm{H}$$

$$E_2 = E_{02} + g_2 M_{J_2} \mu_B \mathrm{H}$$

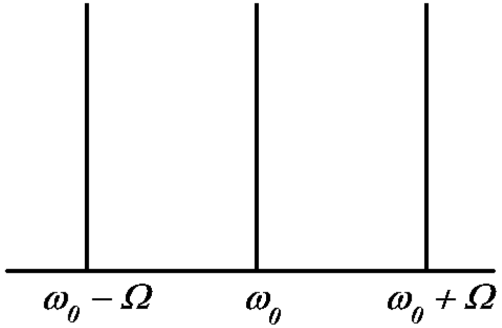
$$\Delta M_J = M_{J_2} - M_{J_1} = 0, \pm 1$$





$$\omega = \omega_0 + \frac{\mu_B \mathrm{H}}{\hbar}\left(g_2 M_{J_2} - g_1 M_{J_1}\right)$$

Нормальный эффект Зеемана



Нормальный лоренцев триплет

$$\Omega = \mu_B \mathrm{H}/\hbar = \frac{e\mathrm{H}}{2mc}$$

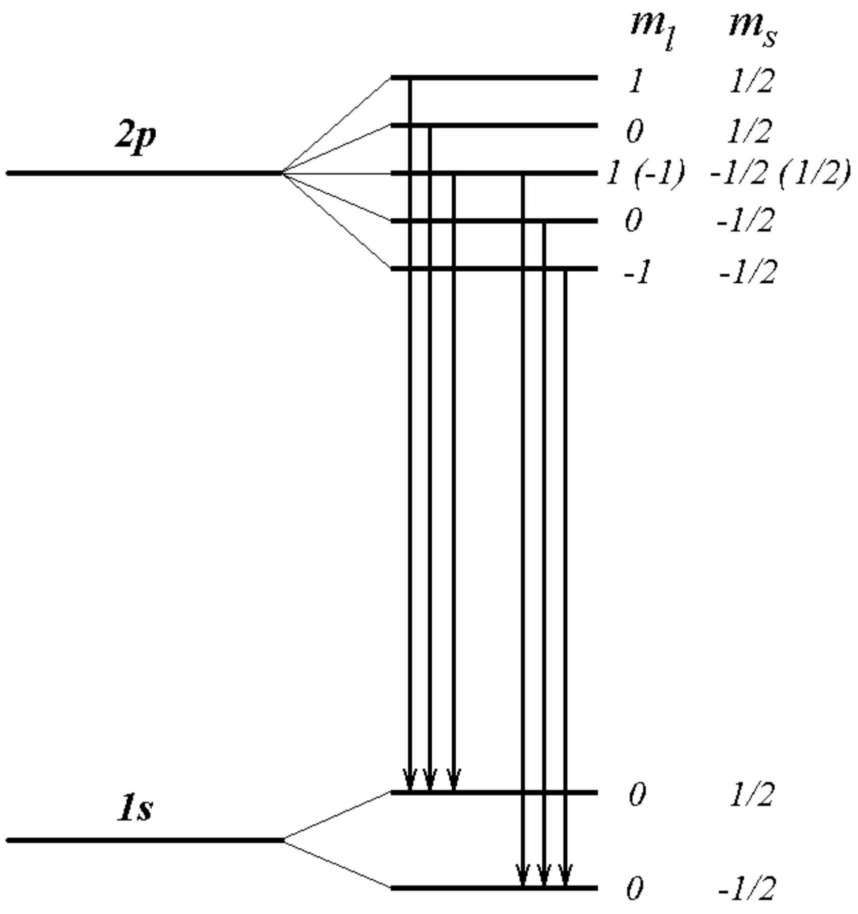
Нормальный эффект наблюдается на синглетных термах

Эффект Пашена и Бака (1912)

Эффект Зеемана в сильном поле $\mu_B H \gg V_{LS}$

водород $2p \rightarrow 1s$

$$\Delta E = \langle LM_L SM_S | \hat{V}_M | LM_L SM_S \rangle = \mu_B H (M_L + 2M_S).$$



$$\hbar\omega = \hbar\omega_0 + \mu_B H (\Delta M_L + 2\Delta M_S)$$

$$\Delta M_L = 0, \pm 1 \qquad \Delta M_S = 0$$

Критерий сильного поля для L_α - линии водорода

$$\mathrm{H} >> \mathrm{H}^* \cong \frac{\alpha^2 Ry}{16\mu_B} \cong 10^4 \text{ Э}$$