Атомная физика

Лекция 9

проф. Попов Александр Михайлович

Стационарная теория возмущений

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

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

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

Ищем решение в виде $\varepsilon_n = E_n + \delta E_n$ $\quad \tilde{\psi}_n = \psi_n + \delta\psi_n$

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

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

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

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

Условия применимости

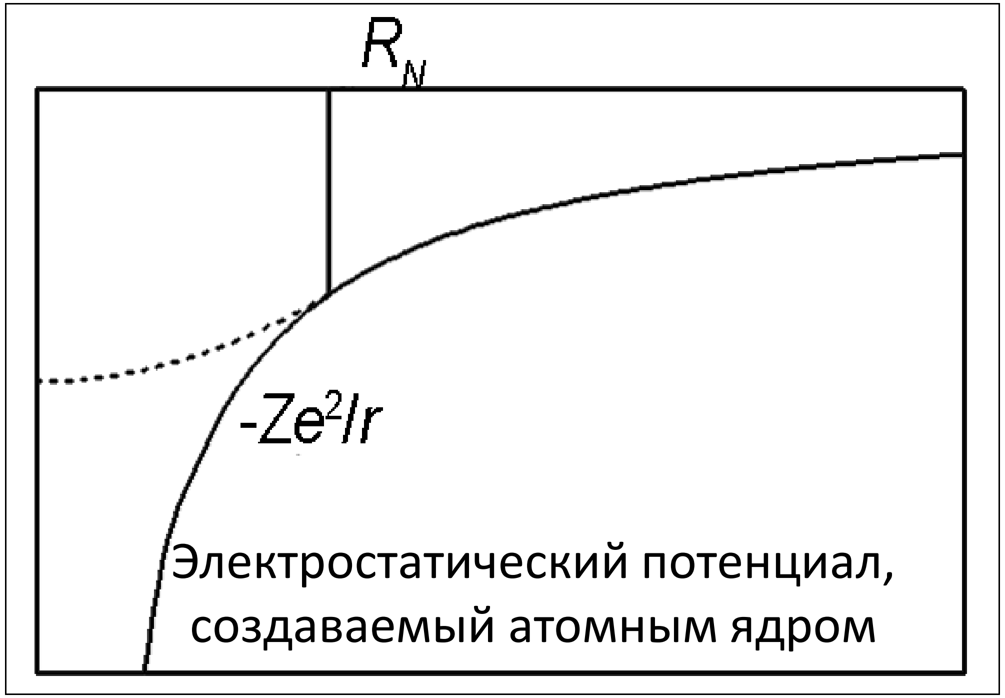
$V_{nn} << \left|E_n - E_k\right|$

$V_{kn} << \left|E_n - E_k\right|$

Второй порядок ТВ $\quad \delta E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} \left|V_{kn}\right|^2 \Big/ (E_n - E_k)$

Стационарная теория возмущений II

Изотопическое смещение уровней, обусловленное конечным размером атомного ядра



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

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

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 $\delta E_{n\ell} = \int |\psi_{n\ell}(\vec{r})|^2 \delta V(\vec{r}) d^3r$

Поскольку $R_N << a_0/Z$ $\delta E_{n\ell} = -e|\psi_{n\ell}(0)|^2 \int\limits_{V_N} (\varphi(r) - Ze/r) d^3r$

$$\delta E_{ns} = \frac{4\pi}{6} e|\psi_{ns}(0)|^2 \int\limits_{V_N} r^2\rho(r) d^3r = \frac{2\pi}{3} e|\psi_{ns}(0)|^2 Ze\overline{R}^2$$

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

Смещаются вверх по энергии только *s* - состояния

Релятивистские эффекты в атоме водорода

I) Релятивистская связь кинетической энергии и импульса

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

$$\Delta E_T = \langle n\ell\,|\,\delta\hat{T}\,|\,n\ell\rangle = -\frac{1}{2mc^2}\langle n\ell\,|\,(\hat{H}_0+Ze^2/r)^2\,|\,n\ell\rangle = -\frac{1}{2mc^2}\left(E_{n\ell}^2+2E_{n\ell}Ze^2<1/r>+Z^2e^4\langle 1/r^2\rangle\right)$$

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

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

Произошло снятие вырождения по орбитальному моменту

II) Спин-орбитальное взаимодействие

$$\hat{V}_{\ell s} = 2\mu_B^2\frac{Z}{r^3}\left(\hat{\vec{\ell}},\hat{\vec{s}}\right) = 2\mu_B^2\frac{Z}{r^3}\frac{\left(\hat{j}^2-\hat{\ell}^2-\hat{s}^2\right)}{2}$$

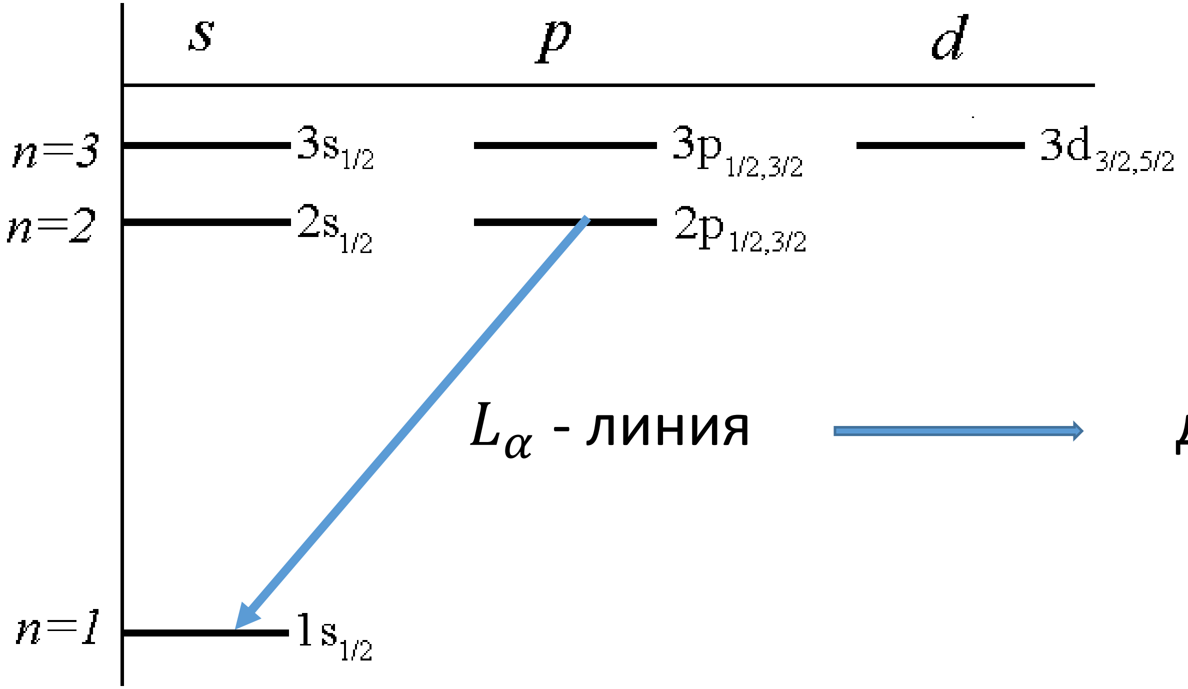
Тут существенно, что работаем в базисе n, ℓ, j, m_j

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

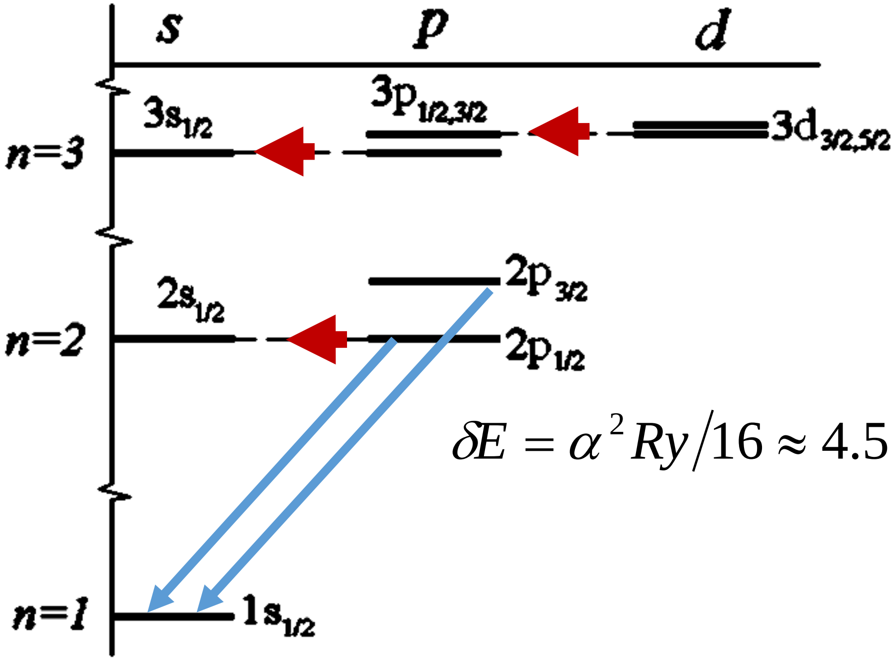
$$\Delta E_{\ell s} = Z\mu_B^2\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle\left(j(j+1)-\ell(\ell+1)-s(s+1)\right)$$

Тонкая структура спектра атома водорода. Формула Дирака

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



L_α - линия → дублет



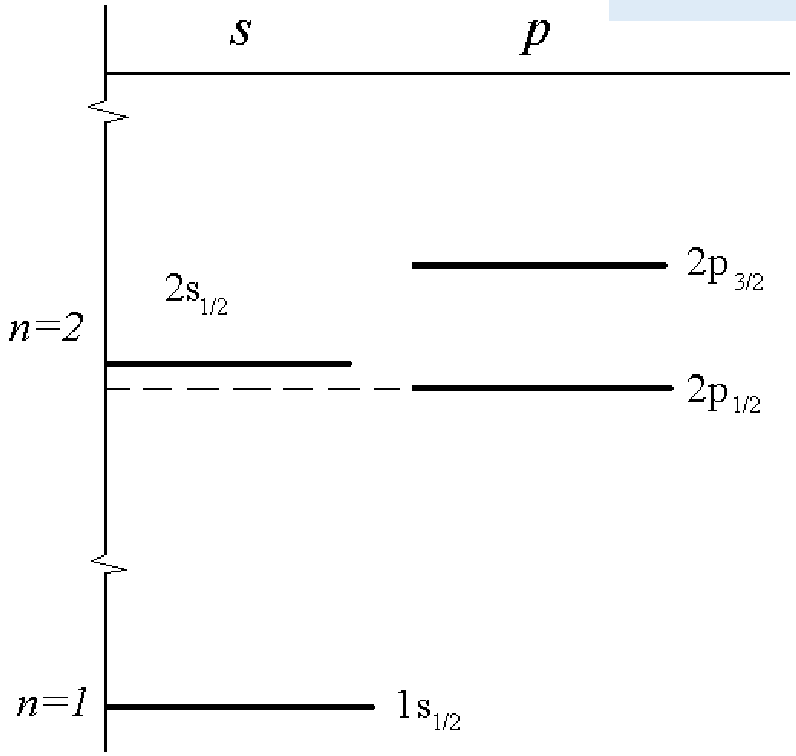
$$\delta E = \alpha^2 Ry/16 \approx 4.5 \cdot 10^{-5}\ эВ$$

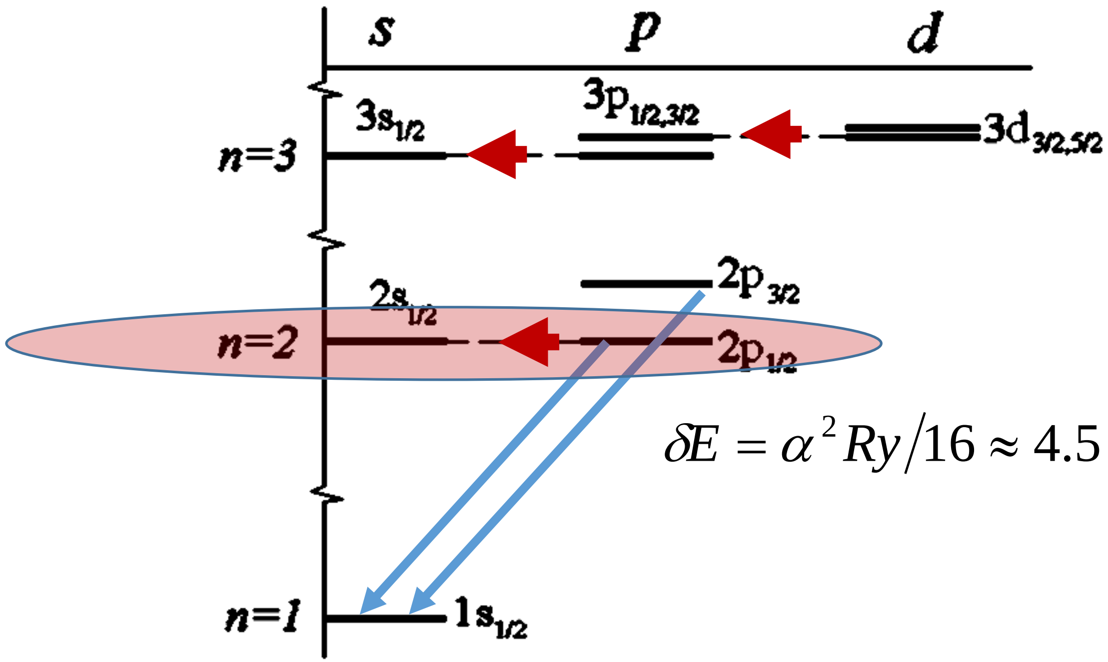
$$\delta E = \Delta E_{n\ell}(j = \ell + 1/2) - \Delta E_{n\ell}(j = \ell - 1/2) = \frac{\alpha^2 Z^4 Ry}{n^3 \ell(\ell+1)}$$

Вырождение снимается не полностью!

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

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





$$\delta E = \alpha^2 Ry/16 \approx 4.5 \cdot 10^{-5}\ эВ$$

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

Лэмбовский сдвиг, (1948)

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 атомах. Действительно, рассмотренная нами первая релятивистская поправка лишь слегка смещает положение уровня, но не приводит к его расщеплению.

$$V \sim (\vec{L}, \vec{S}) \qquad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

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 $1s_{1/2}$ ($\lambda = 21$ см)

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

Приложения к физике ядра и астрофизике