

Лекция 9.

Изотопическое смещение атомных уровней, связанное с конечным размером атомного ядра.

В качестве примера использования теории возмущений рассмотрим вопрос о влиянии конечного размера атомного ядра на положение энергетических уровней в водородоподобном ионе с зарядом Z . Действительно, при определении энергетического спектра водородоподобных ионов с зарядом Z (см. Л_7) мы исходили из предположения, что ядро является точечным. На самом деле ядро имеет конечный размер (порядка 10^{-13} см для легких ядер и $\sim 10^{-12}$ см - для тяжелых). В результате потенциальная энергия взаимодействия электрона с ядром описывается формулой

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (9.1)$$

лишь приближенно. Точное выражение для энергии взаимодействия может быть записано в виде

$$\tilde{V}(\vec{r}) = -e\phi(\vec{r}), \quad (9.2)$$

где $\phi(\vec{r})$ - электростатический потенциал, создаваемый ядром в пространстве. Распределение $\phi(\vec{r})$ удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\nabla^2 \phi = -4\pi\rho(\vec{r}), \quad (9.3)$$

где функция $\rho(\vec{r})$ определяется распределением заряда в атомном ядре. Вследствие малости размера ядра R_N по сравнению с размером области локализации электронной волновой функции можно ожидать, что (9.1) и (9.2) дают близкие распределения. В такой ситуации истинное положение энергетических уровней будет приблизительно описываться формулой

$$E_{n\ell} = -Ry \frac{Z^2}{n^2}, \quad (9.4)$$

а смещение уровней, обусловленное конечным размером ядра, можно рассчитать по теории возмущений. Рассматривая в качестве невозмущенного атомного гамильтониана оператор

$$\hat{H}_0 = \hat{T} - \frac{Ze^2}{r},$$

запишем полный гамильтониан водородоподобного иона в виде

$$\hat{H} = \hat{T} - e\phi(\vec{r}) = \hat{H}_0 + \delta\hat{V}.$$

Здесь в качестве оператора возмущения выступает разность между потенциальной энергией взаимодействия электрона с реальным и точечным ядром:

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

запишем выражение для поправки к энергетическому уровню в виде

$$\delta E_{n\ell} = \int |\psi_{n\ell}(\vec{r})|^2 \delta V(\vec{r}) d^3r. \quad (9.5)$$

Мы будем считать, что распределение заряда в атомном ядре является сферически симметричным, то есть $\rho(\vec{r}) = \rho(|\vec{r}|)$. Вид функций $V(r)$ и $-e\phi(r)$ для этого случая приведены на рис.9.1. Как видно, вне ядра выражения (9.1) и (9.2) совпадают и интеграл в (9.5) берется по объему атомного ядра, то есть смещение энергетического уровня обусловлено тем, что с некоторой вероятностью электрон может быть локализован внутри атомного ядра. При этом существенно, что неточность ядра приводит к тому, что потенци-

альная яма становится более мелкой по сравнению с моделью точечного ядра. Следовательно, величина возмущения $\delta V > 0$, и уровни должны сместиться вверх относительно положения, определяемого из (9.4).

Заметим, что вследствие малости размера атомного ядра по сравнению с областью локализации электронной волновой функции

$$R_N \ll a_0 / Z,$$

можно считать, что в области интегрирования значение электронной волновой функции практически постоянно и определяется величиной $\psi_{n\ell}(r=0)$. Поэтому перепишем (9.5) в виде

$$\delta E_{n\ell} = -e|\psi_{n\ell}(0)|^2 \int_{V_N} (\varphi(r) - Ze/r) d^3r. \quad (9.6)$$

Принимая во внимание поведение радиальных волновых функций вблизи точки $r=0$

$$R_{n\ell}(r) \sim r^\ell, (\ell \neq 0) \text{ и } R_{ns}(0) \neq 0,$$

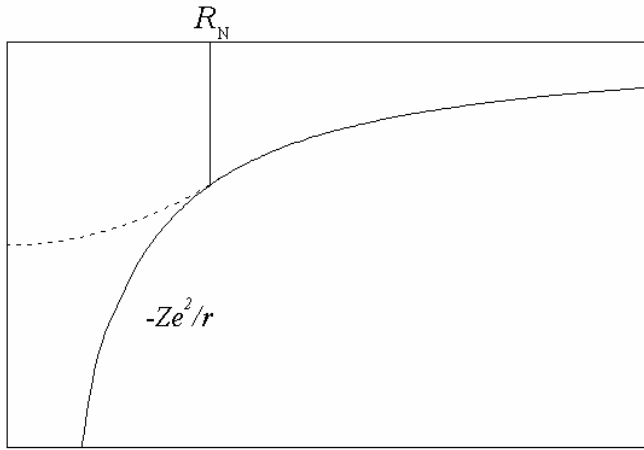


Рис.9.1. Электростатический потенциал, создаваемый атомным ядром.

находим, что в нашем приближении будут смещены только s -состояния, все состояния с ненулевым значением орбитального момента останутся неподвижны, то есть

$$\delta E_{n\ell \neq 0} = 0.$$

Так получилось потому, что центробежный потенциальный барьер отжимает электрон от центра и делает вероятность обнаружить его внутри атомного ядра исчезающе малой. Что касается s -состояний, то для них центробежный барьер отсутствует, и электрон с некоторой вероятностью может быть обнару-

жен внутри атомного ядра, что и приводит к смещению уровней с нулевым значением орбитального момента.

Для вычисления интеграла (9.6) воспользуемся следующим тождеством

$$\nabla^2(r^2) \equiv 6. \quad (9.7)$$

С учетом (9.7) перепишем (9.6) в виде

$$\delta E_{ns} = -\frac{1}{6} e|\psi_{ns}(0)|^2 \int_{V_N} \nabla^2(r^2) (\varphi(r) - Ze/r) d^3r. \quad (9.8)$$

Интегрируя (9.8) по частям, получим

$$\delta E_{ns} = -\frac{1}{6} e|\psi_{ns}(0)|^2 \int_{V_N} r^2 \cdot \nabla^2 (\varphi(r) - Ze/r) d^3r. \quad (9.9)$$

Учтем теперь, что $\nabla^2\left(\frac{1}{r}\right) = 4\pi\delta(\vec{r})$, и $r^2\delta(\vec{r}) = 0$. Тогда из выражения (9.9) с учетом (9.3)

найдем

$$\delta E_{ns} = \frac{4\pi}{6} e|\psi_{ns}(0)|^2 \int_{V_N} r^2 \rho(r) d^3r = \frac{2\pi}{3} e|\psi_{ns}(0)|^2 Ze\bar{R}^2, \quad (9.10)$$

где $\bar{R}^2 = \frac{1}{Ze} \int r^2 \rho(r) d^3r$ - протонный среднеквадратичный радиус ядра. Поскольку

$$|\psi_{ns}(0)|^2 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3 n^3},$$

для поправки к уровню энергии ns окончательно находим

$$\delta E_{ns} = \frac{4}{3} Z^4 \frac{\bar{R}^2}{a_0^2} \frac{1}{n^3} Ry. \quad (9.11)$$

Как видно, поправка быстро убывает с увеличением главного квантового числа, что связано с уменьшением вероятности обнаружить электрон внутри ядра по мере увеличения n . Дальнейшее уточнение полученного результата зависит от конкретного вида функции, описывающей распределение плотности заряда внутри ядра. Например, в случае равномерного распределения заряда

$$\rho(r) = \frac{Ze}{(4/3)\pi R_N^3} = const$$

$$\text{имеем } \bar{R}^2 = \frac{3}{5} R_N^2$$

Итак, учет конечного размера ядра привел к смещению s - уровней вверх относительно их положения, рассчитанного в приближении точечного ядра. Уровни с ненулевым значением орбитального момента остались несмещенными. Таким образом, «случайное» вырождение по орбитальному моменту оказалось частично снятым. Величина смещения достаточно мала. Например, для основного состояния атома водорода, полагая, что для протона $\bar{R} \approx 0.8 \cdot 10^{-13} \text{ см}^1$, из (9.11) находим

$$\delta E_{1s} = \frac{4}{3} \frac{\bar{R}^2}{a_0^2} Ry \approx 3 \cdot 10^{-10} Ry,$$

однако, поправка быстро растет с увеличением заряда ядра. Поскольку различные изотопы одного и того же химического элемента имеют несколько отличающиеся размеры ядра, то положение s - уровней у них несколько отличается. То есть, конечный размер ядра, так же как и конечная масса ядра (см. Л_3), является причиной изотопического сдвига атомных уровней. Рассматриваемый нами эффект оказывается тем существенней, чем тяжелее ядро атома.

Тонкая структура спектра атома водорода.

Выше мы уже говорили, что наличие у электрона в атоме помимо орбитального еще и собственного механического и связанного с ним магнитного момента ведет к появлению спин - орбитального взаимодействия, которое мы не учитывали ранее при анализе спектра атома водорода. Самый простой взгляд на природу спин - орбитального взаимодействия заключается в попытке представить его как взаимодействие двух магнитных моментов, один из которых связан с орбитальным, а другой – со спиновым движением электрона. В этом случае энергия взаимодействия может быть оценена как

$$E_{\ell s} \sim \frac{\vec{\mu}_\ell \vec{\mu}_s}{r^3}. \quad (9.12)$$

Такая оценка не вполне обоснована. Действительно, выражение для диполь – дипольного взаимодействия вида (9.12) получается в предположении, что характерное расстояние r между пространственными областями, в которых локализованы токи, создающие маг-

¹ См., например, И.М.Капитонов «Введение в физику ядра и частиц», М.: УРСС, (2002), с.23-24.

нитные моменты, существенно больше размера этих областей (см рис.9.2). В нашем случае это не так. Эти пространственные размеры совпадают по порядку величины и могут быть оценены как a_0 - боровский радиус. Более строгое рассмотрение природы спин – орбитального взаимодействия буде дано позже. А сейчас оценим величину энергии с помощью выражения (9.12). Полагая, что $\mu_\ell \cong \mu_s \cong \mu_B = e\hbar/2mc$ и $r \cong a_0$, получим

$$E_{ls} \cong \frac{\mu_B^2}{a_0^3} \cong \frac{1}{2} \alpha^2 Ry, \quad (9.13)$$

где $\alpha = e^2/\hbar c$ - постоянная тонкой структуры. Как видно, энергия спин

– орбитального взаимодействия примерно на четыре порядка меньше, чем энергия электростатического взаимодействия электрона с ядром, что позволяет решать задачу об учете спин - орбитального взаимодействия в атоме по теории возмущений.

С другой стороны, вспомним, что скорость электрона на первой боровской орбите определяется как $v_1/c = \alpha$, а, следовательно, учет релятивистской связи кинетической энергии и импульса частицы

$$T = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 \quad (9.14)$$

даст также добавку порядка $\alpha^2 Ry$ в энергию системы. Действительно, разлагая выражение в ряд по малому параметру p/mc , получим

$$T = mc^2 \left(\sqrt{1 + (p/mc)^2} - 1 \right) = mc^2 \left(1 + \frac{1}{2} (p/mc)^2 - \frac{1}{8} (p/mc)^4 + \dots - 1 \right) \approx \frac{p^2}{2m} - \frac{(p^2/2m)^2}{2mc^2} = T_0 - T_0^2/2mc^2. \quad (9.15)$$

Здесь первый член разложения дает «обычную» нерелятивистскую энергию $T_0 = p^2/2m$, а второй – релятивистскую поправку. Учитывая, что в атоме водорода $T_0 \cong Ry$, для поправки получаем

$$\delta T \approx Ry^2/2mc^2 \approx \alpha^2 Ry, \quad (9.16)$$

т.е. величину порядка энергии спин – орбитального взаимодействия. Таким образом, обе поправки имеют релятивистскую природу и должны быть учтены одновременно. Как мы увидим, учет этих поправок приводит к возникновению так называемой тонкой структуры спектра атома водорода, причем величина тонкого расщепления определяется квадратом постоянной тонкой структуры².

После проведенных качественных рассуждений перейдем к последовательному рассмотрению обеих поправок в рамках квантовомеханической теории возмущений. Будем рассматривать водородоподобный ион с зарядом Z . Невозмущенный гамильтониан этой системы имеет вид

$$\hat{H}_0 = \hat{T}_0 - \frac{Ze^2}{r}. \quad (9.17)$$

Решение задачи на собственные значения и собственные функции гамильтониана \hat{H}_0 хорошо известно (Л_7). Наша задача найти поправки к уровням энергии, обусловленные релятивистскими эффектами.

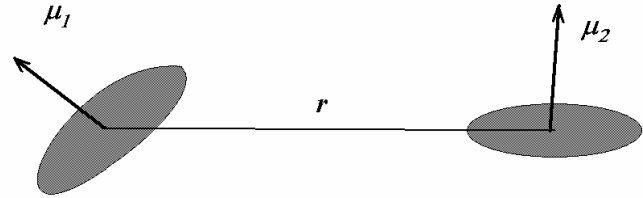


Рис.9.2. Магнитное диполь - дипольное взаимодействие.

² Отсюда происхождение названия – постоянная тонкой структуры.

1) Учет релятивистской связи импульса и энергии электрона.

Начнем с учета поправки к энергии электрона, обусловленной релятивистской связью энергии и импульса электрона. Переход к квантовой механике означает, что выражение (9.15) приобретает смысл соотношения между операторами. Величину $-\hat{T}_0^2/2mc^2$, которая с физической точки зрения представляет собой релятивистскую поправку к кинетической энергии электрона, мы будем трактовать как оператор возмущения $\delta\hat{T}$. Тогда поправка к положению энергетических уровней может быть записана в виде

$$\Delta E_T = \langle n\ell | \delta\hat{T} | n\ell \rangle = -\frac{1}{2mc^2} \langle n\ell | (\hat{H}_0 + Ze^2/r)^2 | n\ell \rangle. \quad (9.18)$$

Учитывая, что $|n\ell\rangle$ есть собственные функции гамильтониана \hat{H}_0 , из (9.18) получаем

$$\Delta E_T = -\frac{1}{2mc^2} (E_{n\ell}^2 + 2E_{n\ell}Ze^2 \langle 1/r \rangle + Z^2 e^4 \langle 1/r^2 \rangle). \quad (9.19)$$

Здесь

$$E_{n\ell} = -Z^2 Ry/n^2 \quad (9.20)$$

- уровни энергии невозмущенного гамильтониана, а знак $\langle \rangle$ означает квантовомеханическое усреднение по состоянию $|n\ell\rangle$. Учитывая, что³

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \int R_{n\ell}^2(r) r dr = \frac{Z}{n^2 a_0}, \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \int R_{n\ell}^2(r) dr = \frac{Z^2}{n^3 a_0^2 (\ell + 1/2)} \quad (9.21)$$

(здесь $R_{n\ell}(r)$ - радиальная волновая функция водородоподобного атома), получим

$$\Delta E_T = \frac{\alpha^2 Z^2}{n} E_{n\ell} \left(\frac{1}{\ell + 1/2} - \frac{3}{4n} \right), \quad (9.22)$$

где $E_{n\ell}$ определяется формулой (9.20). Как видно, поправка растет как четвертая степень Z и быстро уменьшается с увеличением главного квантового числа. Важно, что учет релятивистской поправки снимает «случайное» вырождение по орбитальному моменту. Все уровни смещаются вниз по энергии, причем уровни с большим значением орбитального квантового числа испытывают меньшее смещение, чем уровни с малым ℓ .

2) Спин – орбитальное взаимодействие.

Рассмотрим теперь другую релятивистскую поправку, приводящую не только к сдвигу, но и расщеплению энергетических уровней, а именно спин – орбитальное взаимодействие. Наша задача теперь записать выражение для оператора спин – орбитального взаимодействия \hat{V}_{ls} . Как уже отмечалось, представление о спин – орбитальном взаимодействии, как о взаимодействии двух магнитных диполей не вполне удовлетворительно. Спин – орбитальное взаимодействие можно рассматривать как релятивистский эффект, заключающийся во взаимодействии собственного магнитного момента электрона с магнитным полем, возникающим в его собственной системе отсчета, определяемой орбитальным движением. В этой системе отсчета ядро с зарядом Ze движется вокруг электрона и создает магнитное поле \vec{H} , которое мы можем записать в виде

$$\vec{H} = \frac{1}{c} [\vec{e}, \vec{v}], \quad (9.23)$$

³ Эти интегралы вычисляются аналитически с учетом свойств обобщенных полиномов Лагерра.

где $\vec{\varepsilon} = \frac{Ze}{r^3} \vec{r}$ - электростатическое поле, создаваемое атомным ядром. Фактически выражение (9.23) есть формула преобразования полей в нерелятивистском случае при переходе из одной системы отсчета в другую⁴. Поэтому выражение для энергии спин - орбитального взаимодействия мы можем записать в виде

$$V_{\ell s} = -(\vec{\mu}_s \vec{H}), \quad (9.24)$$

где $\vec{\mu}_s = -\frac{e}{mc} \vec{s}$ - собственный магнитный момент электрона. В дальнейшем нам будет удобно выражать спиновый и орбитальный механический моменты в единицах постоянной Планка, поэтому выражение для $\vec{\mu}_s$ перепишем в виде

$$\vec{\mu}_s = -2\mu_B \vec{s}. \quad (9.25)$$

Подставляя в (9.24) выражения (9.23) и (9.25), получим

$$V_{\ell s} = -(\vec{\mu}_s \vec{H}) = 2\mu_B \frac{Ze}{cr^3} ([\vec{r}, \vec{v}] \vec{s}).$$

Учитывая, что $\vec{\ell} = [\vec{r}, m\vec{v}]$, и выражая момент также в постоянных Планка, окончательно для энергии спин – орбитального взаимодействия получим

$$V_{\ell s} = 4\mu_B^2 \frac{Z}{r^3} (\vec{\ell}, \vec{s}).$$

Переход к квантовой механике означает замены физических величин соответствующими операторами. Поэтому имеем выражение для оператора энергии спин – орбитального взаимодействия

$$\hat{V}_{\ell s} = 4\mu_B^2 \frac{Z}{r^3} (\hat{\ell}, \hat{s}).$$

Правильное выражение для этого оператора (оно может быть получено в рамках релятивистской теории Дирака) отличается от приведенного выше ровно в два раза:

$$\hat{V}_{\ell s} = 2\mu_B^2 \frac{Z}{r^3} (\hat{\ell}, \hat{s}). \quad (9.26)$$

Дополнительный множитель («два») называют поправкой Томаса⁵ – Френкеля⁶. Для дальнейшего нам будет удобно переписать оператор спин – орбитального взаимодействия в виде:

$$\hat{V}_{\ell s} = 2\mu_B^2 \frac{Z}{r^3} \frac{(\hat{j}^2 - \hat{\ell}^2 - \hat{s}^2)}{2}, \quad (9.27)$$

где $\hat{\ell}^2$, \hat{s}^2 - операторы квадрата орбитального и спинового моментов, \hat{j}^2 - оператор квадрата полного механического момента электрона $\hat{j} = \hat{\ell} + \hat{s}$. Напомним, что все эти моменты выражаются в единицах постоянной Планка. Для определения поправки к положению энергетического уровня нам надо теперь посчитать величину матричного элемента оператора $\hat{V}_{\ell s}$ в базисе собственных функций невозмущенного гамильтониана.

⁴ На самом деле выражение (9.23) справедливо при переходе из одной инерциальной системы отсчета в другую, и не может быть использовано при переходе во вращающуюся систему координат. С этим обстоятельством связана необходимость введения поправки в энергию спин – орбитального взаимодействия, называемой поправкой Томаса – Френкеля.

⁵ L. Thomas (1910-) – американский физик – теоретик.

⁶ Я.И.Френкель (1894-1952) – советский физик-теоретик.

Прежде чем перейти к вычислению соответствующего матричного элемента вспомним, что в атоме водорода (на самом деле – для электрона в любом центрально – симметричном потенциале) мы сумели построить два различных набора базисных функций $|n, \ell, m_\ell, m_s\rangle$ и $|n, \ell, j, m_j\rangle$. Какой из них нам сейчас следует использовать? Заметим, что эти два набора были введены для атома в предположении, что спин – орбитальное взаимодействие отсутствует. Наличие спин – орбитального взаимодействия в атоме меняет ситуацию. Легко видеть, что полный атомный гамильтониан $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{\ell s}$ не коммутирует с операторами z – проекции орбитального и спинового моментов. А значит, в стационарном состоянии атома эти величины точно не определены, т.е. стационарное состояние не может быть охарактеризовано набором квантовых чисел n, ℓ, m_ℓ, m_s . В то же время легко убедиться, что полный атомный гамильтониан коммутирует с операторами \hat{j}^2 и \hat{j}_z . На этом основании мы приходим к выводу, что в присутствии спин – орбитального взаимодействия мы должны работать в базисе состояний $|n, \ell, j, m_j\rangle$. Тогда, учитывая, что

$$\begin{aligned}\hat{j}^2 |n, \ell, j, m_j\rangle &= j(j+1) |n, \ell, j, m_j\rangle, \\ \hat{\ell}^2 |n, \ell, j, m_j\rangle &= \ell(\ell+1) |n, \ell, j, m_j\rangle, \\ \hat{s}^2 |n, \ell, j, m_j\rangle &= s(s+1) |n, \ell, j, m_j\rangle,\end{aligned}$$

запишем выражение для поправки к энергии состояния, обусловленную учетом спин – орбитального взаимодействия, в виде

$$\Delta E_{\ell s} = Z\mu_B^2 \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle (j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)), \quad (9.28)$$

где $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \int \frac{1}{r} R_{nl}^2(r) dr$ – усредненное по квантовому состоянию значение $1/r^3$. Значение этого интеграла также известно:

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{Z^3}{n^3 a_0^3 \ell(\ell+1)(\ell+1/2)}. \quad (9.29)$$

Тогда, учитывая, что $s = 1/2$, $j = \ell \pm 1/2$, из (9.28) получим

$$\Delta E_{\ell s} = \begin{cases} -\frac{\alpha^2 Z^2}{n} E_{n\ell} \cdot \frac{1}{2(\ell+1/2)(\ell+1)}, & j = \ell + 1/2, \\ \frac{\alpha^2 Z^2}{n} E_{n\ell} \cdot \frac{1}{2\ell(\ell+1/2)}, & j = \ell - 1/2. \end{cases}$$

Окончательный ответ получается, если просуммировать обе поправки

$$\Delta E_{n\ell} = \Delta E_T + \Delta E_{\ell s} = -\frac{\alpha^2 Z^4 Ry}{n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (9.30)$$

Формула (9.30) называется формулой тонкой структуры (формулой Дирака) и описывает релятивистские поправки в положение энергетических уровней в спектре водородоподобного иона⁷. Как видно, спин – орбитальное взаимодействие приводит к расщеплению уровней по значению полного механического момента атома. Уровень с большим значе-

⁷ С точки зрения теоретической физики полученная формула является разложением по параметру αZ решения уравнения Дирака для частицы в кулоновском поле.

нием $j = \ell + 1/2$ лежит выше, чем уровень с меньшим значением $j = \ell - 1/2$. Такая ситуация имеет понятную физическую интерпретацию. Величина энергии спин - орбитального взаимодействия определяется скалярным произведением $V_{\ell s} \sim (\vec{\ell}\vec{s})$. Если вектора $\vec{\ell}$ и \vec{s} «параллельны» друг другу (т.е. $j = \ell + 1/2$), величина энергии $V_{\ell s}$ оказывается

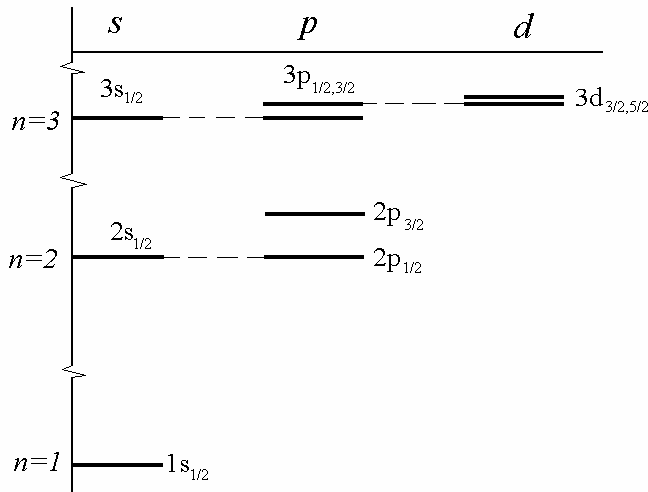


Рис.9.3. Тонкая структура спектра атома водорода.

положительной. Наоборот, при «антипараллельной» ориентации векторов скалярное произведение меняет знак, и энергия $V_{\ell s}$ оказывается отрицательной. Заметим, однако, что вырождение снимается частично. В соответствии с нашей теорией состояния с различными значениями ℓ , но одним и тем же значением j (например, $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$) оказываются по-прежнему вырожденными.

Общий вид спектра атома водорода с учетом тонкой структуры приведен на рис.9.3. Как видно, все уровни с ненулевым значением орбитального момента расщепились на

двое (стали дублетами). Величина этого дублетного расщепления может быть легко определена с помощью формулы Дирака:

$$\delta E = \Delta E_{n\ell}(j = \ell + 1/2) - \Delta E_{n\ell}(j = \ell - 1/2) = \frac{\alpha^2 Z^4 Ry}{n^3 \ell(\ell + 1)}. \quad (9.31)$$

В частном случае для дублета $2p_{1/2, 3/2}$ в атоме водорода имеем $\delta E = \alpha^2 Ry/16 \approx 4.5 \cdot 10^{-5}$ эВ. Это максимальная величина тонкого расщепления в атоме водорода. Как видно из (9.31), она быстро убывает с увеличением главного и орбитального квантового чисел.

Тонкая структура спектров многоэлектронных атомов.

Мы пока не рассматривали особенности строения многоэлектронных атомов. Однако, некоторые соображения о тонкой структуре их спектров можно высказать уже сейчас. Так, 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. В такой ситуации ее влиянием на положение уровней с различными значениями орбитального момента ℓ в многоэлектронном атоме можно пренебречь. В то же время спин – орбитальное взаимодействие приведет к расщеплению уровня в мультиплет, число компонент которого определяется числом возможных ориентаций векторов $\vec{\ell}$ и \vec{s} в пространстве, т.е. числом различных значений \vec{j} . Более подробно с тонкой структурой спектров многоэлектронных атомов мы познакомимся в Л_11.

Понятие о сверхтонкой структуре атомных спектров.

Атомное ядро, так же как и электрон, обладает собственным механическим моментом количества движения. Он складывается из собственных механических моментов (спинов) и орбитальных моментов протонов и нейтронов. Известно, что спины протона и нейтрона равны $I_p = I_n = 1/2$. Поэтому, спин ядра атома водорода $I_H = I_p = 1/2$, спин ядра атома дейтерия $I_D = 1$ (в дейтроне спины протона и нейтрона «параллельны» друг другу). Наличие орбитального движения протонов в атомном ядре приводит к существованию ненулевого магнитного момента атомных ядер. Кроме того, у нуклонов есть собственный магнитный момент, связанный со спином:

$$\vec{\mu}_N = g_N \mu_{NB} \vec{I}_n, \quad (9.32)$$

здесь g_N - так называемый g - фактор нуклона, $\mu_{NB} = e\hbar/2m_p c$ - ядерный магнетон Бора, m_p - масса протона. Оказывается для протона $g_p \approx 5.6$, а для нейтрона $g_n \approx -3.8$. Отметим, что наличие ненулевого магнитного момента у электрически нейтрального нейтрона косвенно свидетельствует о наличии у него некоторой пространственной структуры. Поскольку проекция спинов нуклонов на некоторую выделенную ось равна $1/2$, то проекции магнитных моментов на ту же ось, очевидно, определяются как

$$\begin{aligned} \mu_{pz} &= 2.8\mu_{NB}, \\ \mu_{nz} &= -1.9\mu_{NB}. \end{aligned}$$

Как видно собственные магнитные моменты нуклонов примерно на три порядка меньше, чем магнитный момент электрона. То же самое касается и магнитного момента, связанного с орбитальным движением протона.

Учет взаимодействия магнитных моментов атомного электрона (или всей совокупности атомных электронов, если мы говорим о многоэлектронном атоме) и атомного ядра приводит к возникновению сверхтонкой структуры атомных спектров. Величина дополнительной энергии атома, обусловленной взаимодействием ядерного магнитного момента с магнитным моментом электронной оболочки атома, может быть оценена как

$$\delta E \sim \frac{\mu_B \mu_{NB}}{a_0^3} \sim \frac{m}{m_p} \alpha^2 Ry \sim 10^{-6} \text{ эВ}. \quad (9.33)$$

С другой стороны по аналогии со спин – орбитальным взаимодействием мы можем записать оператор взаимодействия, приводящего к сверхтонкой структуре, в виде

$$\hat{V}_{JI} = B(\hat{J}\hat{I}), \quad (9.34)$$

где \hat{J} и \hat{I} - операторы полного механического момента электронной оболочки атома и спина ядра, B - константа связи, ее численное значение может быть оценено по формуле (9.33). Величина энергии (9.34) зависит от ориентации векторов \hat{J} и \hat{I} в пространстве относительно друг друга. Число таких ориентаций определяется квантовым числом F , определяющим значение суммарного механического момента атома $\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}$. Из общих правил сложения моментов (см. Л_8) число различных значений F определяется как $\min\{(2J+1), (2I+1)\}$. Это и будет число компонент сверхтонкого расщепления.

В качестве примера чуть более подробно остановимся на сверхтонкой структуре основного состояния атома водорода $1s_{1/2}$. В этом случае полный механический момент атома равен спиновому моменту единственного атомного электрона, а спин ядра определяется спиновым моментом протона. Поэтому квантовое число F может принимать два значения: $F=1$ если спины электрона и протона «параллельны» и $F=0$ в случае

«антипараллельной» ориентации спинов. В соответствии с этим приходим к выводу, что сверхтонкая структура основного состояния атома водорода состоит из двух компонент. Длина волны перехода между этими подуровнями лежит в радиочастотном диапазоне и составляет $\lambda = 21$ см. Излучение атомов водорода на этой длине волны широко используется в современной радиоастрономии при изучении пространственного распределения атомарного водорода во Вселенной.

Еще одной причиной смещения атомных уровней является наличие у многих ядер электрического квадрупольного момента, обусловленного отличием их формы от сферической. Как правило, этот эффект следует учитывать, прежде всего, для тяжелых атомов ($Z \gg 1$).

Отметим, что спины и магнитные моменты, а также электрические квадрупольные моменты атомных ядер различных изотопов одного и того же химического элемента имеют разные значения. Поэтому оказывается различной и их сверхтонкая структура (как по величине расщепления, так и по числу компонент). В этом смысле сверхтонкая структура также является одним из проявлений изотопических эффектов в атомных спектрах. Это означает также, что по характеру сверхтонкого расщепления часто оказывается возможным определить спин и магнитный момент атомного ядра, т.е. методами атомной радиоспектроскопии исследовать свойства атомных ядер.

Задачи.

- 9.1. Определить заряд ядра Z водородоподобного иона, при котором величины изотопического сдвига $1s$ состояния, связанные с конечной массой и конечным размером ядра, совпадают. Оценку провести в предположении, что число протонов и нейтронов в ядре одинаково, а радиус ядра связан с его массовым числом соотношением $R \cong 1.4 \cdot 10^{-13} \cdot A^{1/3}$ см.
- 9.2. Определить величину расщепления $2s$ и $2p$ состояний, обусловленную конечным размером ядра, в водородоподобном ионе с зарядом Z (см. задачу (9.1)).
- 9.3. Мюон ($m_\mu \cong 207m_e$) находится в поле тяжелого атомного ядра ($Z = 92$, $A = 238$). Определить приближенный вид волновой функции основного состояния и оценить потенциал ионизации такой системы. Считать распределение заряда в пределах ядра равномерным. Радиус ядра связан с его массовым числом соотношением $R \cong 1.4 \cdot 10^{-13} \cdot A^{1/3}$ см.
- 9.4. Оценить величину энергетического сдвига основного состояния атома водорода при его помещении в постоянное однородное электрическое поле (эффект Штарка).
- 9.5. В рамках модели Бора для круговой орбиты определить величину поправки к положению энергетического уровня в водородоподобном ионе с зарядом Z , обусловленной релятивистской связью энергии и импульса. Полученный результат сравнить с квантовомеханическим расчетом.
- 9.6. Используя формулу тонкой структуры найти отношение энергий тонкого расщепления $4p$ и $4f$ уровней атома водорода.
- 9.7. Оценить отношение энергий тонкого расщепления $3p$ и $3d$ уровней атома лития ($Z=3$).
- 9.8. Оценить величину тонкого расщепления дублета $2p_{1/2,3/2}$ в водородоподобном ионе урана ($Z = 92$).
- 9.9. Определить число компонент сверхтонкой структуры основного состояния атомов дейтерия и трития. Спины ядер равны $I = 1$ и $I = 1/2$ соответственно.