Cvičení KT1 15. 11. 2022 (7. cvičení)

Témata:

- hyperjemná struktura = *štěpení spektrálních čar vlivem spin-spinové interakce*

Hyperjemná struktura

Jádro a stejně tak i elektron jsou nabité částice se spinem 1/2, a proto mají vnitřní magnetický moment. Tyto magnetické momenty na sebe působí magnetickou silou, což ovlivňuje spektrum atomu, které naměříme. V této části si spočteme, jak taková interakce vypadá.

Uvažujme opět atom vodíku (zde budeme používat přirozené jednotky $\hbar = c = \varepsilon_0 = 1$):

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\hat{r}}\,. \tag{1}$$

Proton v jádře vodíku je nabitá částice se spinem 1/2, a proto má vnitřní magnetický moment

$$\vec{\mu} = g_j \frac{-Ze}{m_j}\hat{\vec{S}}_j \tag{2}$$

(g_j je gyromagnetický poměr jádra, zde protonu $g_p \approx 2,792$). (I) Podle klasické teorie elektromagnetismu tento magnetický moment budí magnetické (dipólové) pole (připomeňem si $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$)

$$\vec{A} = \frac{1}{4\pi}\frac{\vec{\mu}\times\vec{r}}{r^3}\,, \quad \vec{B} = \frac{1}{4\pi}\frac{3\vec{n}\vec{n}\cdot\vec{\mu} - \vec{\mu}}{r^3} + \frac{2}{3}\vec{\mu}\delta(r)\,. \tag{3}$$

Částici se spinem ve vnějším elektromagnetickém poli popisuje Pauliho hamiltonián (ve zjednodušeném tvaru):

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e}{m}\vec{A}\cdot\hat{\vec{p}} - \frac{e}{m}\hat{\vec{S}}\cdot\vec{B} + e\varphi\,. \tag{4}$$

(II) Dosazením nyní do tohoto hamiltoniánu za vektorový potenciál $\vec{A}$, magnetickou indukci $\vec{B}$ a skalární potenciál φ dostaneme hamiltonián

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Z\alpha}{r} - \frac{e}{m}\frac{\vec{\mu}\cdot\hat{\vec{L}}}{4\pi r^3} - \frac{e}{4\pi r^3}\left[\hat{\vec{S}}\cdot\vec{\mu}\frac{8\pi}{3}\delta(r) - \frac{1}{r^3}\left(\hat{\vec{S}}\cdot\vec{\mu} - 3(\vec{n}\cdot\hat{\vec{S}})(\vec{n}\cdot\vec{\mu})\right)\right]\,. \tag{5}$$

(III) Dosazením za $\vec{\mu}$ a přechodem k atomovým jednotkám pak máme v prvním řádu poruchové metody korekci k energii

$$E_n^{(1)} = \frac{Z\alpha g_j}{m_e m_j}\left(m_r Z\alpha\right)^3 \langle\psi_n|\left[\frac{1}{r^3}\hat{\vec{S}}_j\cdot\hat{\vec{L}} + \frac{8\pi}{3}\delta(r)\hat{\vec{S}}_e\cdot\hat{\vec{S}}_j - \frac{1}{r}\left(\hat{\vec{S}}_e\cdot\hat{\vec{S}}_j - 3\vec{n}\cdot\hat{\vec{S}}_e\vec{n}\cdot\hat{\vec{S}}_j\right)\right]|\psi_n\rangle\,. \tag{6}$$

(IV) Jakou interakci vyjadřují jednotlivé členy a pro které stavy (s, p, d,...) přispívají?

Uvažujme nyní základní stav atomu vodíku. Spočteme si, jak se změní jeho spektrum, zahrneme-li výše popsanou interakci.

(V) Jak vypadá ψ_n pro základní stav a které z členů v rovnici (6) přispějí?
(VI) Kolik máme možných stavů, které při výpočtu budeme muset uvažovat?
(VII) Použijeme tedy pro výpočet poruchovou metodu pro degenerované nebo nedegenerované stavy?
(VIII) Jak tyto 4 stavy vypadají?
(IX) Jak můžeme vyjádřit člen $\hat{\vec{S}}_e\cdot\hat{\vec{S}}_j$ (vhodně pro nadcházející výpočet)?
(X) Jak působí složky $\hat{\vec{S}}_e$ a $\hat{\vec{S}}_j$ na jednotlivé stavy?
(XI) Spočtěme si působení členu $\hat{\vec{S}}_e\cdot\hat{\vec{S}}_j$ na stavy. Měli bychom dostat matici

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{pmatrix}\,. \tag{7}$$

(XII) Najděme vlastní stavy a vlastní vektory.
(XIII) Jak bude tedy vypadat výsledné spektrum?

Sodíkový dublet a jeho struktura

V druhé části dnešního cvičení se zaměříme na sodíkový atom.

(I) Kolik má atom sodíku elektronů?

(II) Jaká je elektronová konfigurace základního a prvního excitovaného stavu?

Atom sodíku má sice 11 elektronů, ale 10 z nich je "pevně" usazeno v $1s$, $2s$ a $2p$ orbitalech (stabilní neonové jádro) a v praxi si všímáme jen toho posledního jednoho valenčního elektronu. Tj. v dobrém přiblížení se na sodík můžeme dívat jako na vodíku podobný atom: jeden elektron v centrálním poli.

Jemná struktura

Tři nejnižší hladiny jemné struktury atomu sodíku se značí, ve spektroskopické notaci nL_J^{2S+1}:
$3\ S_{1/2}^2$, $3\ P_{1/2}^2$ a $3\ P_{3/2}^2$.

(III) Jaká kvantová čísla charakterizují tyto tři hladiny?

(IV) Jaká je degenerace jednotlivých hladin?

Pro atom s jedním valenčním elektronem můžeme napsat efektivní hamiltonián pro spin-orbitální interakci ve tvaru

$$\hat{H} = \xi(r)\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}\,, \tag{8}$$

kde $\xi(r)$ zastupuje všechny radiální závislosti. Dále můžeme označit

$$A = \int_0^\infty \xi(r)\,|R_{3p}|^2\,\mathrm{d}r\,. \tag{9}$$

A vyjadřuje "sílu" interakce (velikost rozštěpení).

(V) Za předpokladu, že za rozštěpení hladin $3\ P_{1/2}^2$ a $3\ P_{3/2}^2$ může pouze spin-orbitální interakce (8), určete hodnotu konstanty A. Energie přechodu mezi $3\ S_{1/2}^2$ a $3\ P_{1/2}^2$, resp. $3\ P_{3/2}^2$, je 16 956, 2 cm^{-1}, resp. 16 943.4 cm^{-1}. Nápověda: Spočtěte $\langle H_{FS}\rangle_{3P}$.

Tyto dvě čáry, které v sodíkovém spektru pozorujeme okolo vlnové délky 589 nm, se označují jako tzv. sodíkový dublet (viz přebal české knihy doc. Zamastila).

Hyperjemná struktura

Uvažujme stabilní izotop sodíku ^{23}Na, jehož jaderný spin je $I = 3/2$. Jelikož maticové elementy hamiltoniánu hyperjemné struktury jsou o několik řádů menší oproti těm popisujícím jemnou strukturu, vystačíme si opět jen s poruchovou metodou do prvního řádu. Interakci spinu jádra $\hat{\vec{I}}$ se spinem elektronu, resp. složeným spinem a orbitálním momentem hybnosti elektronu, $\hat{\vec{J}}$, můžeme popsat pro jednoduchost hamiltoniánem

$$\hat{H} = A\hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{I}}, \tag{10}$$

kde A je opět konstanta závisející na typu hladiny (jemné struktury).

Zkušenost nám říká, že by mohlo být výhodné zavést operátor celkového momentu hybnosti, tj. složit spin jádra, spin elektronu a orbitální moment hybnosti elektronu:

$$\hat{\vec{F}} = \hat{\vec{I}} + \hat{\vec{J}}. \tag{11}$$

(VI) Co platí pro komutátory hamiltoniánu hyperjemné struktury (10) a operátorů jednotlivých momentů hybnosti $\hat{F}^2$, $\hat{J}^2$, $\hat{I}^2$, $\hat{F}_z$, $\hat{J}_z$, $\hat{I}_z$?

(VII) Jakou bázi je tedy vhodné zvolit?

(VIII) Jak se změní hladiny $3\ S_{1/2}^2$, $3\ P_{1/2}^2$ a $3\ P_{3/2}^2$ po uvážení hyperjemné struktury? Zakreslete taky schématicky.

(IX) Které (dipólové) přechody jsou povolené?

Povinná úloha na příště

Zaveďme operátor celkového spinu $\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}_e + \hat{\vec{S}}_p$. Jeho vlastní stavy $|S, M\rangle$ jsou, jako obvykle, dané $\hat{S}^2\,|S, M\rangle = S(S+1)\,|S, M\rangle$ a $\hat{S}_z\,|S, M\rangle = M\,|S, M\rangle$.

(0,5 b.) Vyjádřete člen $\hat{\vec{S}}_e \cdot \hat{\vec{S}}_j$ pomocí $\hat{S}^2$, $\hat{S}_e^2$ a $\hat{S}_j^2$.

(0,5 b.) Vyjádřete stavy z (VIII), resp. jejich lineární kombinace z (XII), v řeči stavů $|S, M\rangle$.

Bonusová úloha

Tentokrát není.