

**Frumeinda- og ljósfræði:**

# **Örfingerð og samsætur**

## **Kaflí 6**

**Jón Tómas Guðmundsson**

**tumi@hi.is**

**7. vika vor 2020**

# Örfingerð

- Fram til þessa höfum við litið á kjarnann sem verandi með hleðslu  $+Ze$  og massa  $M_N$
- Að auki hefur kjarninn segulvægi  $\mu_I$  og kjarnspuna  $\mathbf{I}$  þannig að

$$\mu_I = h_J \mu_N \mathbf{I}$$

- Ef við berum þetta saman við segulvægi rafeindar tökum við eftir að hér er ekkert neikvætt formerki
- Kjarnar hafa mun smærri segulvægi en rafeindir, kjarnsegulvægið  $\mu_N$  er tengt Bohr segulvæginu með  $\mu_B$  um massahlutfall rafeindar og róteindar

$$\mu_N = \mu_B \frac{m_e}{M_p} \approx \frac{\mu_B}{1836}$$

## Örfíngerð

- Víxlverkun  $\mu_I$  við segulflæðisþéttleikann sem stafar frá rafeindum  $\mathbf{B}_e$  gefur Hamiltonian

$$H_{\text{HFS}} = -\mu_I \cdot \mathbf{B}_e$$

- Þetta veldur örfíngerð, sem eins og nafnið innifelur er fínni en fíngerð
- Þrátt fyrir það er hún auðfundin fyrir samsætur sem hafa kjarnspuna ( $I \neq 0$ )
- Segulsviðið við kjarnann er stærst fyrir s-rafeindir og við reiknum það fyrst
- Við ræðum stuttlega örfíngerð fyrir rafeindir með  $l \neq 0$  og hrif af svipaðri stærðargráðu

## Örfingerð

- Við höfum hingað til gert ráð fyrir að rafeindirnar hafi hleðsluþéttleika

$$-e|\psi(r)|^2$$

- Til að reikna segulvíxlverkun gerum við ráð fyrir s-rafeind og finnum seglun

$$\mathbf{M} = -g_S\mu_B\mathbf{S}|\psi(r)|^2$$

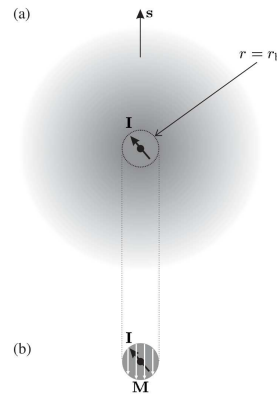
- Þetta svarar til heildar segulvægis rafeindar

$$-g_S\mu_B\mathbf{S}$$

sem er dreift þannig í rúminu að rúmmálsstakið  $d^3\mathbf{r}$  hafi framlagið  $|\psi(r)|^2 d^3\mathbf{r}$  af heildinni

# Örfíngerð

- Fyrir s-rafeindir er þessi dreifing kúlusamhverf og umhverfir kjarnann eins og sjá má á myndinni



Frá Foot (2005)

- Til að reikna sviðið við  $r = 0$  notum við niðurstöðu úr sígildri rafsegulfræði, að innan einsletrar segulmagnaðrar kúlu er segulflæðisþéttleikinn

$$\mathbf{B}_e = \frac{3}{2}\mu_0\mathbf{M}$$

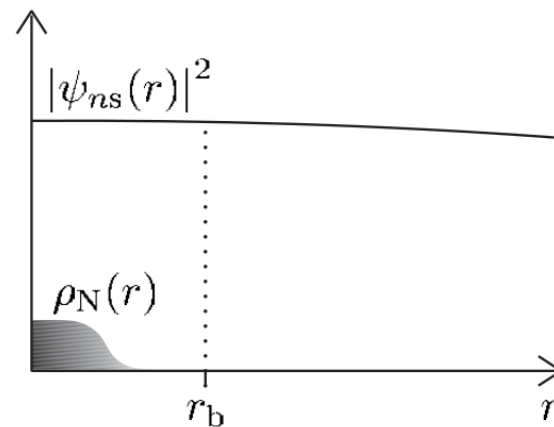
## Örfíngerð

- Hér þarf þó a hafa varan á vegna þess að dreifingin í  $\mathbf{M} = -g_S \mu_B \mathbf{s} |\psi(r)|^2$  er ekki einsleit, hún er háð  $r$
- Gerum ráð fyrir kúludreifingu í tveimur hlutum
  - Kúla af radía  $r = r_b$ , þar sem  $r \ll a_0$  þannig að kvaðrat byljufallsins sé fasti  $|\psi(0)|^2$  um allt innra svæðið
  - Þá er seglunin innan einsleitar kúlu

$$\mathbf{B}_e = -\frac{2}{3} \mu_0 g_S \mu_B |\psi(0)|^2 \mathbf{s}$$

- Hluti dreifingarinnar utan kúlunnar  $r > r_b$  framkallar ekkert svið við  $r = 0$
- Líkindaþéttleikadreifing  $|\psi(r)|^2$  s-rafeindar fyrir  $r \ll a_0$  er nánast fasti

# Örfingerð



Frá Foot (2005)

- Þar með er

$$H_{\text{HFS}} = g_I \mu_N \mathbf{I} \frac{2}{3} \mu_0 g_S \mu_B |\psi(0)|^2 \mathbf{s} = A \mathbf{I} \cdot \mathbf{s}$$

- Þetta er nefnt snertivíxlverkun Fermi (e. Fermi contact interaction) sem byggir á að  $|\psi(0)|^2$  sé endanlegt

## Örfingerð

- Þetta má einnig rita

$$H_{\text{HFS}} = A\mathbf{I} \cdot \mathbf{J}$$

vegna þess að  $\mathbf{J} = s$  fyrir  $l = 0$

- Þetta gildir einnig almennt og  $\mathbf{I} \cdot \mathbf{J}$  gildir þegar  $l \neq 0$
- Örfín víxlverkun veldur því að  $\mathbf{I}$  og  $\mathbf{J}$  breyta um stefnu en heildar hverfiþungi atóms  $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{J}$  er áfram fasti
- Stærðirnar  $\mathbf{I} \cdot \mathbf{B}$  og  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{B}$  eru ekki fastar í þessari pólveltu (e. precession)  $\mathbf{I}$  og  $\mathbf{J}$  um  $\mathbf{F}$



## Örfingerð

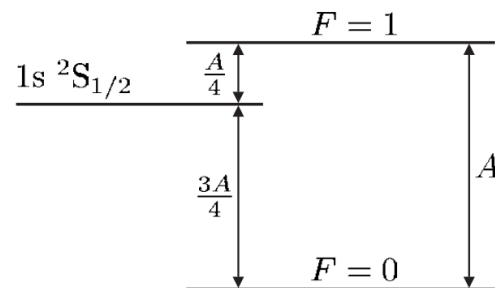
- Vegna þessa eru  $M_I$  og  $M_J$  ekki góðar skammtatölur
- Í stað þessa notum við  $F$  og  $M_F$  og eiginástönd  $H_{\text{HFS}}$  eru  $|IJFM_F\rangle$  og væntigildið

$$E_{\text{HFS}} = A\langle \mathbf{I} \cdot \mathbf{J} \rangle = \frac{A}{2} \{F(F + 1) - I(I + 1) - J(J + 1)\}$$

## Örfíngerð – $1s^2S_{1/2}$ grunnástand vetnis

- Örfíngerð  $1s^2S_{1/2}$  grunnástand vetnis
- Hér er  $J = 1/2$  og róteind hefur spuna  $I = 1/2$  svo að  $F = 0$  og  $1$  og þessi örfínu stig hafa orku

$$E_{\text{HFS}} = \frac{A}{2} \{F(F + 1) - I(I + 1) - J(J + 1)\} = \begin{cases} A/4 & \text{fyrir } F = 1 \\ -3A/4 & \text{fyrir } F = 0 \end{cases}$$



Frá Foot (2005)

## Örfíngerð – $1s \ ^2S_{1/2}$ grunnástand vetnis

- Klofnunin milli örfíngerðar er

$$\Delta E_{\text{HFS}} = A$$

og

$$A = \frac{2}{3} \mu_0 g_s g_I \mu_N \frac{Z^3}{\pi a_0^3 n^3}$$

og fyrir róteind er  $g_I = 5.6$  svo fyrir  $n = 1 = Z$  þá er

$$\frac{\Delta E_{\text{HFS}}}{h} = 1.42 \text{ GHz}$$

sem er nálægt mældu gildi

$$1420405751.7667 \pm 0.0009 \text{ Hz}$$

$\implies$  Dæmi 6.1

## Örfingerð – $l \neq 0$

- Rafeindir með  $l \neq 0$  á braut um kjarna gefa segulsvið

$$\mathbf{B}_e = \frac{\mu_0}{4\pi} \left\{ \frac{-e\mathbf{v} \times (-\mathbf{r})}{r^3} - \frac{\mu_e - 3(\mu_e \cdot \hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{r}}}{r^3} \right\}$$

þar sem  $-\mathbf{r}$  táknar stöðu kjarnans með tilliti til rafeindar á braut

- Fyrri liðurinn stafar af brautarhreyfingu
- Þessi liður svarar til lögmáls Biot-Savart í rafsegulfræði

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{I\mathbf{ds} \times \mathbf{r}}{r^3}$$

og færslan í stefnu straumsins er tengd hraða rafeindarinnar um

$$d\mathbf{s} = \mathbf{v}dt$$

## Örfingerð – $l \neq 0$

- Hér er  $dt$  örsmæðarbreyting í tíma og straumur er tengdur hleðslu um  $I dt = Q$
- Hann inniheldur krossfeldi  $-e\mathbf{v}$  við  $-\mathbf{r}$  og  $-e\mathbf{r} \times \mathbf{v} = 2\mu_B \mathbf{I}$
- Síðari liðurinn er segulsviðið sem stafar frá spunatvípólsvægi rafeindar  $\mu_e = -2\mu_B \mathbf{s}$  (þegar  $g - s = 2$ ) við  $-\mathbf{r}$
- Við getum ritað

$$\mathbf{B}_e = -2 \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mu_B}{r^3} \left\{ \mathbf{1} - \mathbf{s} + \frac{3(\mathbf{s} \cdot \mathbf{r})\mathbf{r}}{r^2} \right\}$$

## Örfíngerð – $l \neq 0$

- Það er pólvelta um  $\mathbf{J}$  og aðeins þættir eftir  $\mathbf{J}$  hafa ekki núll tímameðaltalsgildi
- Vörpunina má finna nákvæmlega en hér notum við nálgun

$$\mathbf{B}_e \sim -2 \frac{\mu_0}{4\pi} \left\langle \frac{\mu_B}{r^3} \right\rangle$$

- Þar með höfum við bilareglu fyrir örfíngerð

$$E_F - E_{F-1} = AF$$

- Örfíngerðar stuðull  $A(n, l, j)$  er smærri fyrir  $l > 0$  heldur en fyrir  $l = 0$  og sama  $n$

## Örfíngerð – $l \neq 0$

- Nákvæmir reikningar sýna að örfíngerðar fastar í vetnislegum stigum  $n^2P_{1/2}$  og  $n^2S_{1/2}$  gefa hlutfallið

$$\frac{A(n^2P_{1/2})}{A(n^2S_{1/2})} = \frac{1}{3}$$

- Þetta hlutfall er smærra í alkalí frumefnum eða 1/10 vegna þess að lokuð hvel skýla kjarnhleðslunni betur fyrir p-rafeindum en fyrir s-rafeindir

# Samanburður á örfíngerð og fíngerð

- Samanburður á fíngerð og örfíngerð

	Fine structure in the <i>LS</i> -coupling scheme	Hyperfine structure in the <i>IJ</i> -coupling scheme
Interaction	$\beta \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$	$A \mathbf{I} \cdot \mathbf{J}$
Total angular momentum	$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$	$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{J}$
Eigenstates	$ LSJM_J\rangle$	$ IJFM_F\rangle$
Energy, $E$	$\frac{\beta}{2} \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\}$	$\frac{A}{2} \{F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)\}$
Interval rule	$E_J - E_{J-1} = \beta J$ (if $E_{s-o} < E_{re}$ )	$E_F - E_{F-1} = AF$ (if $A \gg \Delta E_{\text{Quadrupole}}$ )

Frá Foot (2005)

- Fíngerð í alkalí frumefnum er gefin með Landé jöfnunni

$$E_{\text{FS}} \sim \frac{Z_i^2 Z_0^2}{(n^*)^3} \alpha^2 hc R_\infty$$

- $Z^4$  skölunin í vetnislegum kerfum er skert í  $E_{\text{FS}} \propto Z^2$ , fyrir hlutlaus atóm þar sem virk ytri atómtala er  $Z_0 = 1$  og  $Z_i \sim Z$  gefur ágæta nálgun á innri gerð



## Samanburður á örfíngerð og fíngerð

- Ef við beitum sviðuðum rökum á örfíngerð sjáum við að  $Z^3$  skölunin verður

$$E_{\text{HFS}} \sim \frac{Z_i^2 Z_0^2}{(n^*)^3} \frac{m_e}{M_p} \alpha^2 hc R_\infty$$

- Massahlutfallið kemur til vegna  $\mu_N/\mu_B = m_e/M_p$
- Örfíngerð skalast eins og  $Z$  á meðan fíngerð skalast eins og  $Z^2$

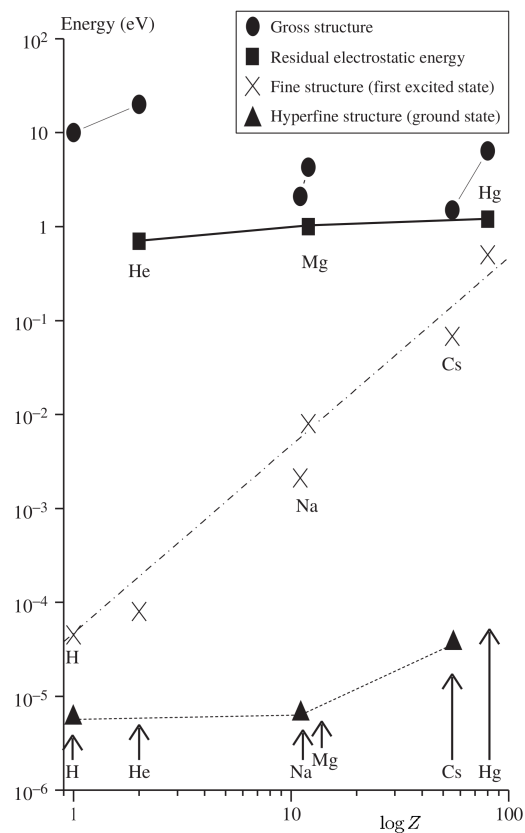
## Samanburður á örfíngerð og fíngerð

- $E_{\text{HFS}}$  breytist talsvert meira en  $E_{\text{FS}}$  eins sést á klofnun Na og Cs

Na, $Z = 11$	Cs, $Z = 55$
$E(3p \ ^2P_{3/2}) - E(3p \ ^2P_{1/2}),$ $\Delta f_{\text{FS}} = 510 \text{ GHz}$	$E(6p \ ^2P_{3/2}) - E(6p \ ^2P_{1/2}),$ $\Delta f_{\text{FS}} = 16\,600 \text{ GHz}$
For the ground state $3s \ ^2S_{1/2},$ $\Delta f_{\text{HFS}} = 1.8 \text{ GHz}$	For the ground state $6s \ ^2S_{1/2},$ $\Delta f_{\text{HFS}} = 9.2 \text{ GHz}$
For $3p \ ^2P_{1/2},$ $\Delta f_{\text{HFS}} = 0.18 \text{ GHz}$	For $6p \ ^2P_{1/2},$ $\Delta f_{\text{HFS}} = 1.2 \text{ GHz}$

Frá Foot (2005)

# Samantburður á örfíngerð og fíngerð



Frá Foot (2005)

- Örfíngerð grunnástands og fíngerðarklofnun fyrstu örvaðra ástanda sem fall af  $Z$

## Samsætuhiðrun – massi

- Til viðbótar við (segultvípól) örfingerð eru nokkur önnur hrif sem geta verið af svipaðri stærðargráðu (eða jafnvel stærri)
- Hér fjöllum við um tvö slík
- Áhrif massa
- Í Bohr líkaninu er orka í réttu hlutfalli við skertan massa rafeindar og þetta gildir einnig fyrir lausnir Schrödinger jöfnunnar
- Fyrir færslu á milli orkustiga  $E_1$  og  $E_2$  er bylgjutalan

$$\tilde{\nu} = \frac{E_2 - E_1}{hc}$$

## Samsætuhiðrun – massi

- Þetta er tengt  $\tilde{\nu}_\infty$  fyrir atóm með óendanlegan massa með

$$\tilde{\nu} = \tilde{\nu}_\infty \times \frac{M_N}{m_e + M_N}$$

þar sem  $M_N$  er massi kjarnans

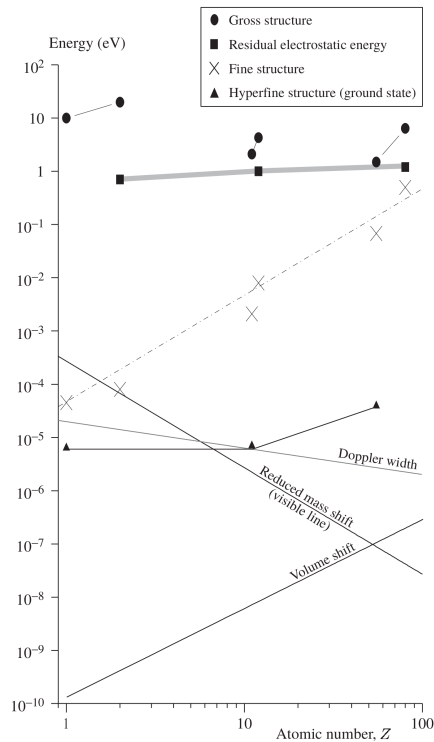
- Ekki er hægt að mæla  $\tilde{\nu}_\infty$
- Hins vegar getum fundið mismun í bylgjutölum milli tveggja samsæta frumefnis, t.d. vetnis og tvívetnis fyrir  $Z = 1$

## Samsætuhiðrun – massi

- Almennt má fyrir tvær samsætur með atómmassa  $A'$  og  $A''$  má gera þá nálgun að  $M_N = A' M_p$  eða  $M_N = A'' M_p$  svo að

$$\begin{aligned}\Delta\tilde{\nu}_{\text{Mass}} &= \tilde{\nu}_{A''} - \tilde{\nu}_{A'} = \frac{\tilde{\nu}_{\infty}}{1 + m_e/A'' M_p} - \frac{\tilde{\nu}_{\infty}}{1 + m_e/A' M_p} \\ &\simeq \tilde{\nu}_{\infty} \left\{ 1 - \frac{m_e}{A'' M_p} - \left( 1 - \frac{m_e}{A' M_p} \right) \right\} \\ &\simeq \frac{m_e}{M_p} \frac{\delta A}{A' A''} \tilde{\nu}_{\infty}\end{aligned}$$

# Samsætuþliðrun – massi

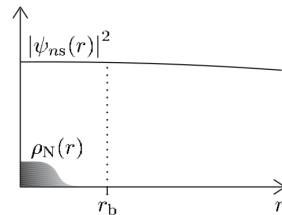


Frá Foot (2005)

- Þetta er nefnt eðlileg massa hliðrun og orkumunurinn  $hc\Delta\tilde{\nu}_{\text{Mass}}$  er sýndur á mynd þar sem  $\delta A = 1$ ,  $A \simeq A' \simeq 2Z$  og  $E_2 - E_1 \simeq 2 \text{ eV}$

## Samsætuhiðrun – rúmmál

- Þrátt fyrir að radíi kjarna sé lítil í samanburði við bylgjuföll rafeinda  $r_N \ll a_0$  þá hefur stærð kjarnans mælanleg áhrif á rófið
- Þessi hrif má meta með truflanareikningi
- Það má beita lögmáli Gauss til að finna hvernig rafsviðið frá kjarnhleðslunni víkur frá  $-Ze/4\pi\epsilon_0 r^2$  fyrir  $r \leq r_N$
- Það má einnig reikna rafstöðu víxlverkun milli tveggja hleðsludreifinga



Frá Foot (2005)

- Hleðsludreifing s-rafeindar og dæmigerðs kjarna eru svipaðar því sem sést á myndinni



## Samsætuhiðrun – rúmmál

- Á svæðinu næst kjarnanum er einsleitur hleðsluþéttleiki

$$\rho_e = -e|\psi(0)|^2$$

- Þegar reglu Gauss er beitt til að finna rafsvið á yfirborði kúlu af radía  $r$  innan svæðis með einsleitum hleðsluþéttleika sést að rafsviðið er í réttu hlutfalli við  $r$
- Tegrún gefur rafstöðumættið

$$\phi_e(r) = -\frac{\rho_e r^2}{6\epsilon_0}$$

- Núllið er valið þannig að  $\phi_e(0) = 0$  – orkumunur er óháður þessu vali

## Samsætuhiðrun – rúmmál

- Með þessu vali hefur punktlaga kjarni núll mættisorku og fyrir kjarnhleðsluna  $\rho_N(r)$  er mættisorkan

$$E_{\text{Vol}} = \int \int \int \rho_N \phi_e d^3 \mathbf{r} = \frac{e}{6a_0} |\psi(0)|^2 \int \int \int \rho_N r^2 d^3 \mathbf{r} = \frac{Ze^2}{6a_0 \epsilon_0} |\psi(0)|^2 \langle r_N^2 \rangle$$

- Tegrið gefur meðalkvaðrat hleðsluradíá kjarnans  $\langle r_N^2 \rangle$  margfaldað með hleðslunni  $Ze$
- Þessi rúmmálshrif eru aðeins gild fyrir s-rafeindir

## Samsætuþliðrun – rúmmál

- Dropalíkanið gefur jöfnu fyrir radía kjarnans sem

$$r_N \simeq 1.2 \times A^{1/3} \text{ fm}$$

- Við getum þá ritað samsætu þliðrun vegna rúmmálsliðar

$$\Delta\tilde{\nu}_{\text{Vol}} = \frac{\Delta E_{\text{Vol}}}{hc} \simeq \frac{\langle r_N^2 \rangle}{a_0^2} \frac{\delta A}{A} \frac{Z}{(n^*)^3} R_\infty$$

## Samsætuhlíðrun – áhrif kjarna

- Við höfum séð að kjarninn hefur sýnileg áhrif á róf atóma
- Ef að örfíngerð kemur fram segir það okkur að kjarninn hafi spuna og fjöldi þátta í örfíngerðinni setur lægri mörk á  $I$
- Gildi á  $F$  og þar með  $I$  má ákvarða með bilareglunni og summureglunni fyrir hlutfallslegan styrk

## Zeeman hrif og örfíngerð

- Áhrif Zeeman hrifa á örfíngerð eru meðhöndluð eins og áður
- Heildar segulvægi atóms samanstendur áhrifum rafeinda og kjarna

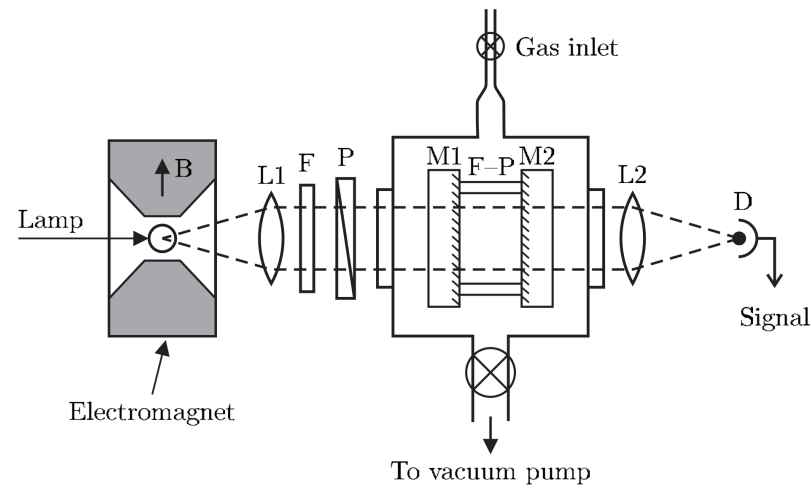
$$\mu_{\text{atom}} = -g_J\mu_B\mathbf{J} + g_I\mu_N\mathbf{I} \approx g_J\mu_B\mathbf{J}$$

- Þar sem  $\mu_N \ll \mu_B$  má líta framhjá framlagi kjarna – nema fyrir mjög næmar mælingar
- Þar með er Hamiltonian fyrir víxlverkun við ytra svið

$$H = g_J\mu_B\mathbf{J} \cdot \mathbf{B}$$

sem er óháð kjarnspuninum

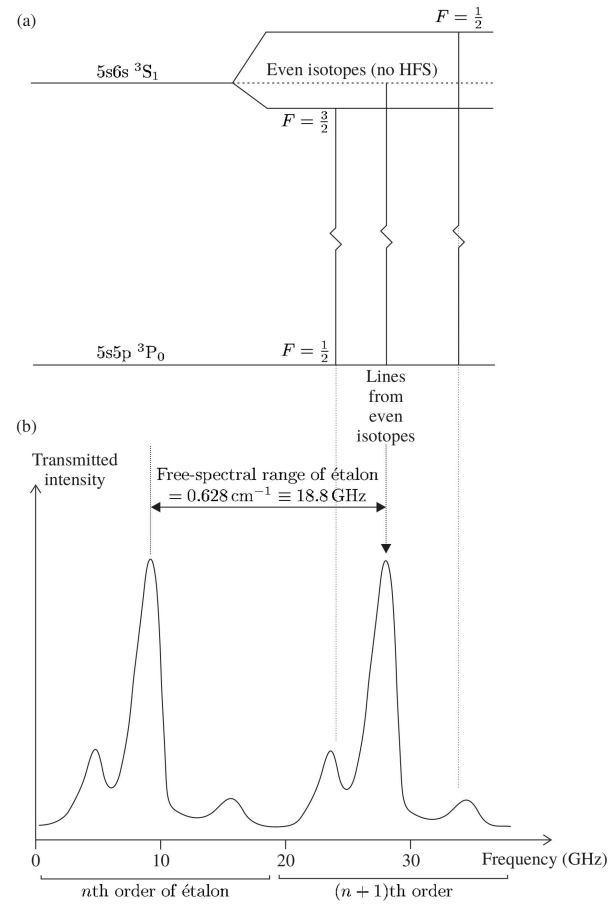
## Mælingar á örfíngerð



Frá Foot (2005)

- Mælibúnaður er svipaður því sem notaður er til að greina Zeeman hrif, nema hvað ekki er þörf á rafsegli þar sem örfíngerð stafar af innra segulsviði atómsins

# Mælingar á örfíngerð



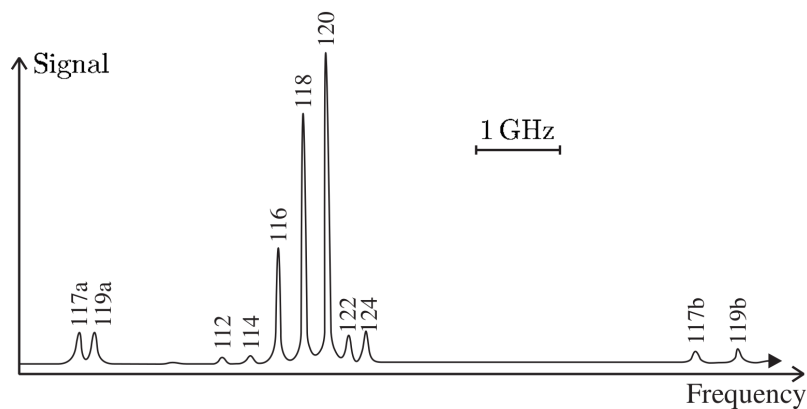
Frá Foot (2005)

## Mælingar á örfíngerð

- Myndin sýnir dæmigert graf frá slíkri tilraun fyrir  $5s5p\ ^3P_0 - 5s6s\ ^3S_1$  línuna í cadmium
- $^3P_0$  stigið hefur enga örfíngerð vegna þess að  $J = 0$  og klofnunin stafar eingöngu af  $5s6s\ ^3S_1$  stiginu
- Sú staðreynd að aðeins  $J = 1$  stigið klofnar aðeins í tvö stig gefur til kynna að  $I = 1/2$
- Ef  $I \geq 1$  kæmu fram þrjú stig
- En hafa ber í huga að Doppler breikkun getur verið sambærileg við örfíngerð



## Mælingar á örfíngerð



Frá Foot (2005)

- Doppler free mæling á  $5s5p\ ^3P_0 - 5s6s\ ^3S_1$  línunum í tinni
- Sjá má samsætuhiðrun til viðbótar við örfíngerð
- Hver toppur er merktur viðeigandi atómmassatölu
- Öddatölu samsæta gefur tvo toppa vegna örfíngerðar

## Frekari upplýsingar

- Þessi kafli er að mestu byggður á kafla 6 hjá Foot (2005).

## Heimildir

Foot, C. J. (2005). *Atomic physics*. Oxford, United Kingdom: Oxford University Press.