Frumeinda- og ljósfræði:

Örfíngerð og samsætur

Kafli 6

Jón Tómas Guðmundsson

tumi@hi.is

7. vika vor 2021

Örfíngerð

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

$$\mu_I = h_J \mu_{\mathrm{N}} \mathbf{I}$$

- 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 μ_{N} er tengt Bohr segulvæginu með μ_{B} um massahlutfall rafeindar og róteindar

$$\mu_{\mathrm{N}} = \mu_{\mathrm{B}} \frac{m_{\mathrm{e}}}{M_{\mathrm{p}}} \approx \frac{\mu_{\mathrm{B}}}{1836}$$

Örfíngerð

- Víxlverkun μ_I við segulflæðisþéttleikann sem stafar frá rafeindum vegna $\mathbf{B}_\mathrm{e}$ gefur Hamiltonian

$$H_{\mathrm{HFS}} = -\mu_I \cdot \mathbf{B}_\mathrm{e}$$

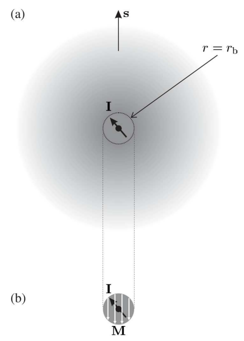
- Þetta veldur örfíngerð, sem eins og nafnið innifelur er fínni en fíngerð
- Þrátt fyrir það er hún auðfundin fyrir samsætur sem hafa kjarnspuna $(I \neq 0)$
- Segulsviðið við kjarnann er stærst fyrir s-rafeindir og við reiknum það fyrst
- Við ræðum stuttlega örfíngerð fyrir rafeindir með $l \neq 0$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

Örfíngerð

- 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
$$M = -g_{\mathrm{S}}\mu_{\mathrm{B}}\mathbf{s}|\psi(r)|^2$$
- Þetta svarar til heildar segulvægis rafeindar
$$-g_{\mathrm{S}}\mu_{\mathrm{B}}\mathbf{s}$$
sem er dreift þannig í rúminu að rúmmálsstakið $\mathrm{d}^3\mathbf{r}$ hafi framlagið $|\psi(r)|^2\mathrm{d}^3\mathbf{r}$ af heildinni

Örfíngerð

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



Frá Foot (2005)

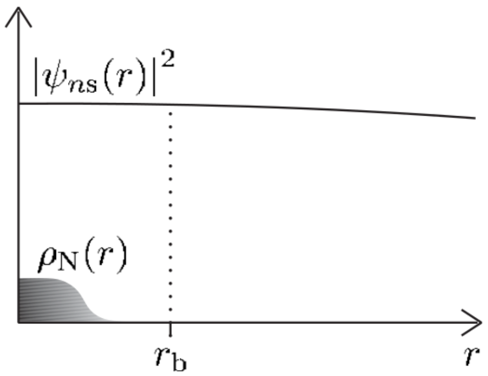
- Til að reikna sviðið við $r = 0$ notum við niðurstöðu úr sígildri rafsegulfræði, að innan einsleitrar segulmagnaðrar kúlu er segulflæðisþéttleikinn

$$\mathbf{B}_\mathrm{e} = \frac{2}{3}\mu_0\mathbf{M}$$

Örfíngerð

- Hér þarf þó a hafa varan á vegna þess að dreifingin í $\mathbf{M} = -g_\mathrm{S}\mu_\mathrm{B}\mathbf{s}|\psi(r)|^2$ er ekki einsleit, hún er háð r
- Gerum ráð fyrir kúludreifingu í tveimur hlutum
  - Kúla af radía $r = r_\mathrm{b}$, þar sem $r \ll a_0$ þannig að kvaðrat byljufallsins sé fasti $|\psi(0)|^2$ um allt innra svæðið
  - Þá er seglunin innan einsleitrar kúlu
$$\mathbf{B}_\mathrm{e} = -\frac{2}{3}\mu_0 g_\mathrm{S}\mu_\mathrm{B}|\psi(0)|^2\mathbf{s}$$
  - Hluti dreifingarinnar utan kúlunnar $r > r_\mathrm{b}$ framkallar ekkert svið við $r = 0$
  - Líkindaþéttleikadreifing $|\psi(r)|^2$ s-rafeindar fyrir $r \ll a_0$ er nánast fasti

Örfíngerð



Frá Foot (2005)

- Þar með er

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

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

Örfíngerð

- Þetta má einnig rita
$$H_{\mathrm{HFS}} = A\mathbf{I}\cdot\mathbf{J}$$
vegna þess að $\mathbf{J} = \mathbf{s}$ 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 $\mathbf{F}$

Örfíngerð

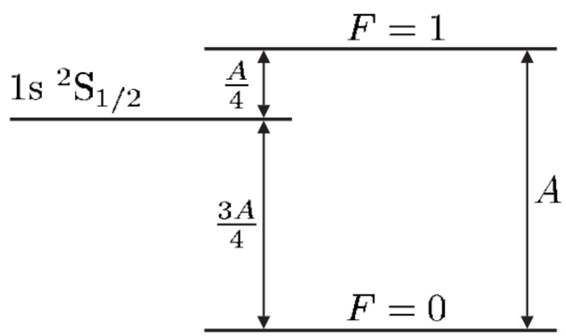
- Vegna þessa eru M_I og M_J ekki góðar skammtatölur
- Í stað þessa notum við F og M_F og eiginástönd $H_{\rm HFS}$ eru $|IJFM_F\rangle$ og væntigildið

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

Örfíngerð 1s $^2\mathrm{S}_{1/2}$ grunnástand vetnis

- Örfíngerð 1s $^2\mathrm{S}_{1/2}$ 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

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



Frá Foot (2005)

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

- Klofnunin milli örfíngerðar er

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

og

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

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

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

sem er nálægt mældu gildi

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

$\Longrightarrow$ Dæmi 6.1

Örfíngerð - $l \neq 0$

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

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

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

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

og færslan í stefnu straumsins er tengd hraða rafeindarinnar um

$$\mathrm{d}\mathbf{s} = \mathbf{v}\mathrm{d}t$$

Örfíngerð - $l \neq 0$

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

$$\mathbf{B}_{\mathrm{e}} = -2\frac{\mu_0}{4\pi}\frac{\mu_{\mathrm{B}}}{r^3}\left\{\mathbf{l} - \mathbf{s} + \frac{3(\mathbf{s}\cdot\mathbf{r})\mathbf{r}}{r^2}\right\}$$

Örfíngerð - $l \neq 0$

- Það er pólvelta um **J** og aðeins þættir eftir **J** hafa ekki núll tímameðaltalsgildi
- Vörpunina má finna nákvæmlega en hér notum við nálgun

$$\mathbf{B}_{\mathrm{e}} \sim -2\frac{\mu_0}{4\pi}\left\langle\frac{\mu_{\mathrm{B}}}{r^3}\right\rangle$$

- 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 np $^2\mathrm{P}_{1/2}$ og ns $^2\mathrm{S}_{1/2}$ gefa hlutfallið

$$\frac{A(n^2\mathrm{P}_{1/2})}{A(n^2\mathrm{S}_{1/2})} = \frac{1}{3}$$

- 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 örfíngerð og fíngerð

	Fine structure in the LS-coupling scheme	Hyperfine structure in the IJ-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 $E_{\text{s-o}} < E_{\text{re}}$)	$E_F - E_{F-1} = AF$ (if $A \gg \Delta E_{\text{Quadrupole}}$)

Frá Foot (2005)

- Fíngerð í alkalí frumefnum er gefin með Landé jöfnunni

$$E_{\text{FS}} \sim \frac{Z_{\text{i}}^2 Z_0^2}{(n^*)^3} \alpha^2 hcR_\infty$$

- 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 $Z_{\text{i}} \sim Z$ gefur ágæta nálgun á innri gerð

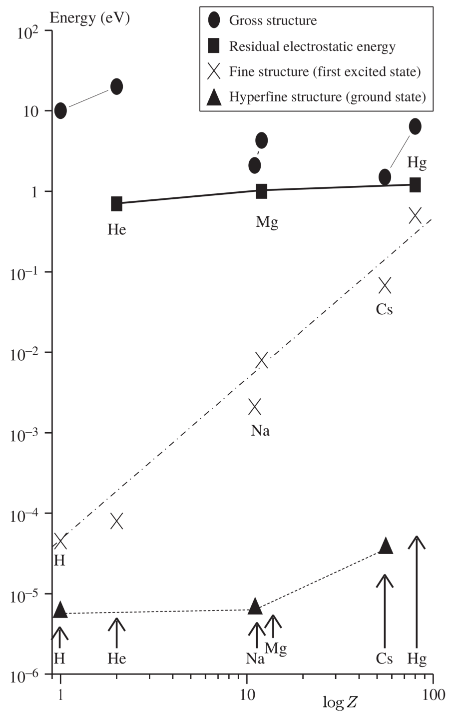
Samanburður á örfíngerð og fíngerð

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

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

Frá Foot (2005)

Samanburður á örfíngerð og fíngerð



Frá Foot (2005)

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

Samsætuhliðrun - massi

- Til viðbótar við (segultvípól) örfíngerð 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

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

Samsætuhliðrun - massi

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

$$\tilde{\nu} = \tilde{\nu}_\infty \times \frac{M_\mathrm{N}}{m_\mathrm{e} + M_\mathrm{N}}$$

  þar sem M_N er massi kjarnans

- Ekki er hægt að mæla $\tilde{\nu}_\infty$

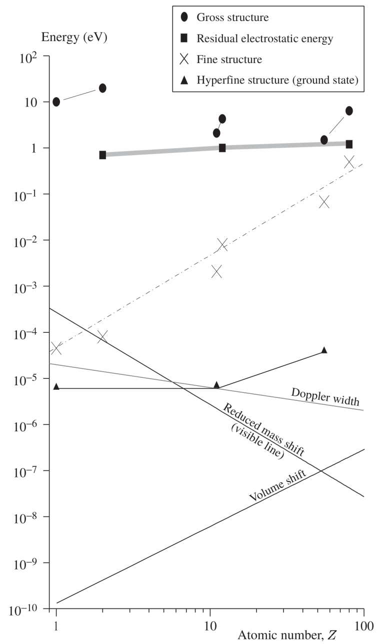
- Hins vegar getum fundið mismun í bylgjutölum milli tveggja samsæta frumefnis, t.d. vetnis og tvívetnis fyrir $Z = 1$

Samsætuhliðrun - massi

- Almennt má fyrir tvær samsætur með atómmassa A' og A'' gera þá nálgun að $M_{\rm N} = A' M_{\rm p}$ eða $M_{\rm N} = A'' M_{\rm p}$ svo að

$$\begin{aligned}
\Delta\tilde{\nu}_{\rm Mass} = \tilde{\nu}_{A''} - \tilde{\nu}_{A'} &= \frac{\tilde{\nu}_\infty}{1 + m_{\rm e}/A'' M_{\rm p}} - \frac{\tilde{\nu}_\infty}{1 + m_{\rm e}/A' M_{\rm p}} \\
&\simeq \tilde{\nu}_\infty \left\{ 1 - \frac{m_{\rm e}}{A'' M_{\rm p}} - \left(1 - \frac{m_{\rm e}}{A' M_{\rm p}} \right) \right\} \\
&\simeq \frac{m_{\rm e}}{M_{\rm p}} \frac{\delta A}{A' A''} \tilde{\nu}_\infty
\end{aligned}$$

Samsætuhliðrun - massi

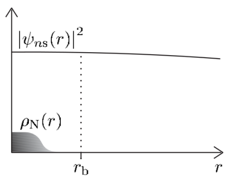


Frá Foot (2005)

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

Samsætuhliðrun - rúmmál

- Þrátt fyrir að radíi kjarna sé lítill í samanburði við bylgjuföll rafeinda $r_\mathrm{N} \ll a_0$ 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 $r \leq r_\mathrm{N}$
- 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

Samsætuhliðrun - rúmmál

- Á svæðinu næst kjarnanum er einsleitur hleðsluþéttleiki

$$\rho_{\mathrm{e}} = -e|\psi(0)|^2$$

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

- Tegrun gefur rafstöðumættið

$$\phi_{\mathrm{e}}(r) = -\frac{\rho_{\mathrm{e}} r^2}{6\epsilon_0}$$

- Núllið er valið þannig að $\phi_{\mathrm{e}}(0) = 0$ - orkumunur er óháður þessu vali

Samsætuhliðrun - rúmmál

- Með þessu vali hefur punktlaga kjarni núll mættisorku og fyrir kjarnhleðsluna $\rho_{\mathrm{N}}(r)$ er mættisorkan

$$E_{\mathrm{Vol}} = \int\int\int \rho_{\mathrm{N}} \phi_{\mathrm{e}} \mathrm{d}^3\mathbf{r} = \frac{e}{6a_0} |\psi(0)|^2 \int\int\int \rho_{\mathrm{N}} r^2 \mathrm{d}^3\mathbf{r}$$

$$= \frac{Ze^2}{6a_0\epsilon_0} |\psi(0)|^2 \left\langle r_{\mathrm{N}}^2 \right\rangle$$

- Tegrið gefur meðalkvaðrat hleðsluradía kjarnans $\left\langle r_{\mathrm{N}}^2 \right\rangle$ margfaldað með hleðslunni Ze

- Þessi rúmmálshrif eru aðeins gild fyrir s-rafeindir

Samsætuhliðrun - rúmmál

- Dropalíkanið gefur jöfnu fyrir radía kjarnans sem

$$r_{\mathrm{N}} \simeq 1.2 \times A^{1/3} \quad \mathrm{fm}$$

- Við getum þá ritað samsætu hliðrun vegna rúmmálsliðar

$$\Delta\tilde{\nu}_{\mathrm{Vol}} = \frac{\Delta E_{\mathrm{Vol}}}{hc} \simeq \frac{r_{\mathrm{N}}^2}{a_0^2}$$

Samsætuhliðrun - 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

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

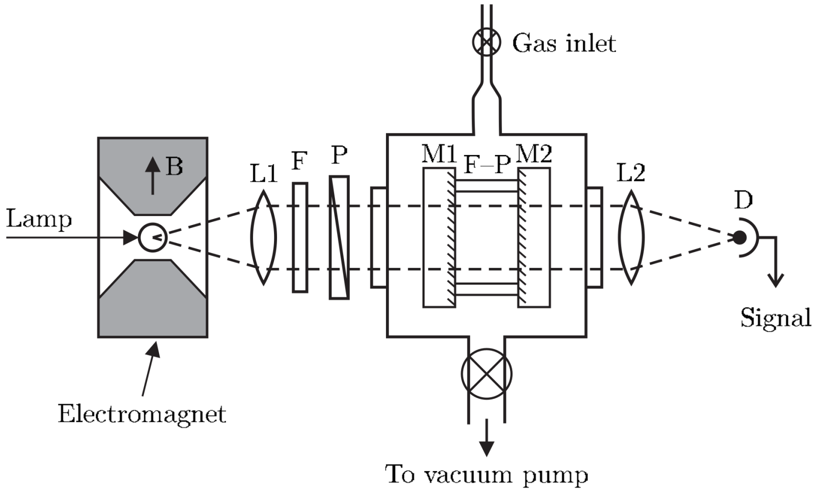
$$\mu_{\text{atom}} = -g_J \mu_{\text{B}} \mathbf{J} + g_I \mu_{\text{N}} I \approx -g_J \mu_{\text{B}} \mathbf{J}$$

- Þar sem $\mu_{\text{N}} \ll \mu_{\text{B}}$ má líta framhjá framlagi kjarna – nema fyrir mjög næmar mælingar
- Þar með er Hamiltonian fyrir víxlverkun við ytra svið

$$H = g_J \mu_{\text{B}} \mathbf{J} \cdot \mathbf{B}$$

sem er óháð kjarnspunanum

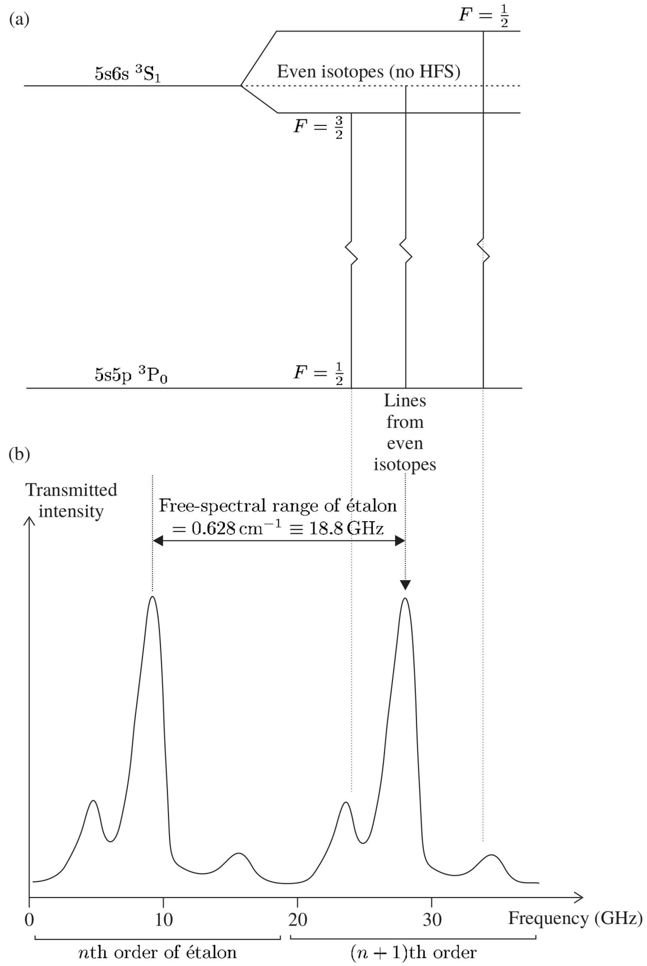
Mælingar á örfíngerð



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

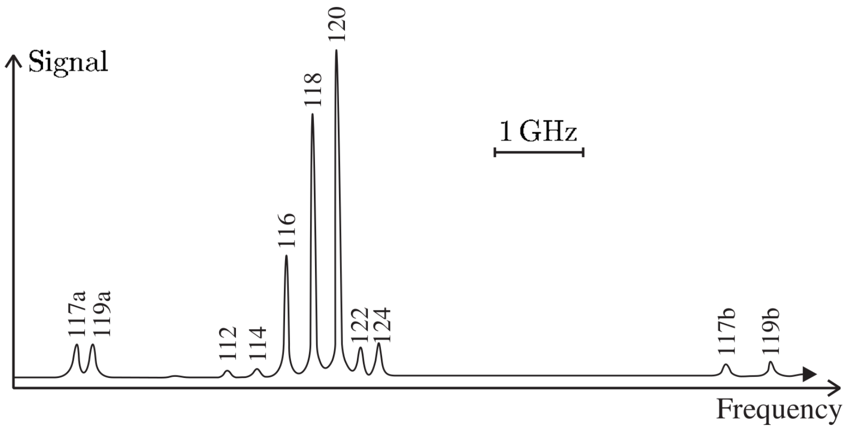


Frá Foot (2005)

Mælingar á örfíngerð

- Myndin sýnir dæmigert graf frá slíkri tilraun fyrir 5s5p $^3\mathrm{P}_0$ - 5s6s $^3\mathrm{S}_1$ línuna í cadmium
- $^3\mathrm{P}_0$ stigið hefur enga örfíngerð vegna þess að $J = 0$ og klofnunin stafar eingöngu af 5s6s $^3\mathrm{S}_1$ stiginu og bara fyrir odda Cd (^{111}Cd og ^{113}Cd)
- 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 tini
- Sjá má samsætuhliðrun til viðbótar við örfíngerð
- Hver toppur er merktur viðeigandi atómmassatölu
- Oddatölu 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.