2.3. A H-ATOM SPEKTRUMÁNAK RÉSZLETEI A KÍSÉRLETEK ALAPJÁN

1. A hidrogénatom spektrumának fő jellemzői

H atom → centrális szerep a kvantum-mechanika kidolgozásánál

- **pontos kísérleti eredmények (sok állapot, sok átmenet)**
- **pontosan ismert kölcsönhatás (E.M.)**
- **zárt kétrészecske-rendszer**

[Összehasonlítás: magfizika:

- ***ismert a módszer***
- ***ismeretlen a kölcsönhatás***
- ***két-részecske rendszerek kísérleti vizsgálata ott nehéz]***

H atom jó kiindulás

- **más atomoknál fellépő jelenségekhez**
- **általánosításhoz**

Eddig: Bohr elmélet → termséma kijött
Milyenek az egyes n-hez tartozó sajátállap.?
Módszer: Schrödinger-egyenlet
a kvantummechanika megmutatja

$$u'' + \frac{2 \cdot m}{\hbar^2} \cdot (E - V) u = 0$$

Ha *l ≠ 0* → fellép rotációs energia is

$$E_{rot} = \frac{1}{2} \cdot \Theta \cdot \omega^2 = \frac{(\Theta \cdot \omega)^2}{2 \cdot \Theta} = \frac{\underline{l}^2}{2 \cdot \Theta} = \frac{\underline{l}^2}{2 \cdot \mu \cdot r^2}$$

$$\Rightarrow V(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{l^2}{2 \cdot \mu \cdot r^2}$$

az n. állapot energiája és hullámfüggvénye:

$$0 = \frac{d^2 u_n(r)}{dr^2} + \frac{2 \cdot \mu}{\hbar^2} \left(E_n + \frac{e^2}{r} - \frac{l \cdot (l+1) \cdot \hbar^2}{2 \cdot \mu \cdot r^2} \right) u_n(r)$$

→ a kvantummechnika megoldja

Most: n mellett l és m fellépte érdekes

$E_{nlm} = E_n = -\frac{\mu \cdot e^4}{2 \cdot \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$ **; a függv.: u_{nlm}**

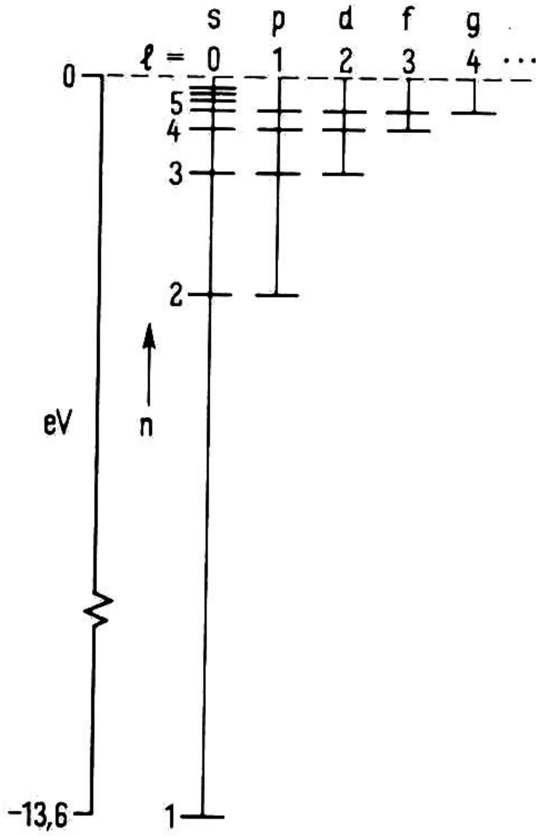
n = 1, 2, 3…. ***főkvantumszám***

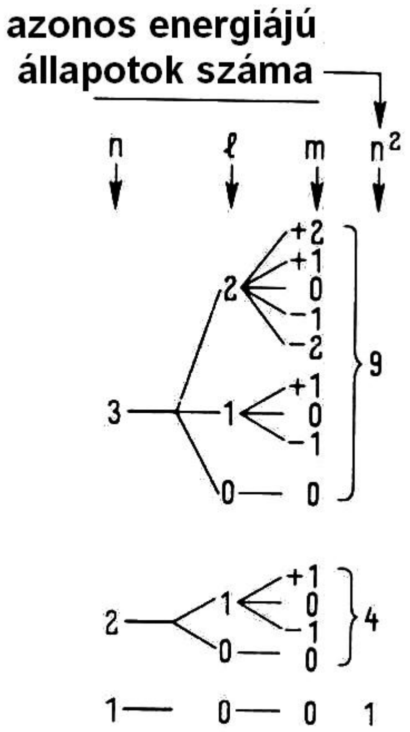
l = 0, 1, 2, 3….(n-1) ***mellékkvantumszám***

m = -l, -l+1,….+l ***mágneses kvantumszám***

n-hez $\sum_{l=0}^{n-1} (2 \cdot l + 1) = n^2$ **különböző hullám-függvény tartozik**

E_n ugyanaz → *l* és *m* szerint degenerált





Degeneráció:

- ***l*** **szerint: Coulomb-törv. alakja az oka**
  [– Cb.-tér → $E \sim 1/n^2$
  – harmonikus oszc. pot. → $E \sim (n+1/2)$
  – négyszögpotenciál: → $E \sim n^2$]

- **m szerint: mágneses térben felhasad**
  (elnevezése innen)

1.2 A H-vonalak finomfelhasadása

Bohr leírás → jó egyezés a kísérlettel
Ok → fő jelenség a Cb.-kölcsönhatás
Nagyobb felbontású spektrométerrel:
H (+ sok atom) vonalak kettősek
→ finomfelhasadás → mellékjelenségek
Finomfelhasadás oka:

a) a mágneses energia különböző ↑↑, ill. ↑↓ spin – pálya impulzusmom. beállásra
b) relativisztikus korrekció

a) A spin-pálya kölcsönhatás
Lényeg: elektron mozgása miatt $\underline{B}_l$ mágn. tér → spinje beállásától függ az energia

$$V_{ls} = \mu_B \cdot \underline{\sigma} \cdot \underline{B}_l \qquad \left(\underline{s} = \frac{1}{2}\cdot\hbar\cdot\underline{\sigma}\right)$$

$\underline{B}_l$ pontos meghatározása nehéz

Magyarázat:
a proton (sok-elektronos atomoknál a töltött részek átlagosan) elektromos teret hoz létre → ebben a térben $\underline{v}$ sebességgel mozgó el.-hoz kötött koordinátarend.ben mágn. tér lép fel (pr. mozog –$\underline{v}$ seb.gel)

$$\underline{B} = -\frac{1}{c}\cdot \underline{v}x\underline{E}$$

$$\underline{E} = -\frac{\underline{r}}{r}\cdot\frac{dV(r)}{dr}\cdot\frac{1}{+e}$$

$$\Rightarrow \underline{B} = -\frac{1}{c\cdot e}\cdot\underline{v}x\frac{\underline{r}}{r}\cdot\frac{dV(r)}{dr};\underline{l} = \underline{r}xm_0\cdot\underline{v}$$

$$\Rightarrow \underline{B} = \frac{1}{m_0\cdot c\cdot e\cdot r}\cdot\frac{dV(r)}{dr}\cdot\underline{l}$$

Nehézség

- **$\underline{v}$ nem egyenletes**
- **a koordinátatengelyek forognak**

→ korrekt levezetés: *nehéz*

Szemléletesen: a protonról nézve az el.-hoz kötött koordinátarendszer egyszer tengelye körül megfordul minden körbe-menetelkor (Thomas-precesszió)

Most bizonyítás nélkül:

$$\underline{B}_l = \frac{1}{2}\cdot\underline{B}$$

→ helyes transzformáció eredménye:

$\frac{1}{2}$-es faktor→ Thomas-faktor)

$$V_{ls} = \mu_B\cdot\underline{\sigma}\cdot\underline{B}_l = \frac{\mu_B}{2\cdot m_0\cdot e\cdot c}\cdot\frac{1}{r}\cdot\frac{dV(r)}{dr}\cdot(\underline{\sigma}\cdot\underline{l}) = \xi(r)\cdot(\underline{s}\cdot\underline{l})$$

[

$$\xi(r) = \frac{1}{2\cdot m_0^2\cdot c^2}\cdot\frac{1}{r}\cdot\frac{dV(r)}{dr}$$

$\xi(r)$ ***helyfüggő operátor***
Mágneses energiát → ezzel
Ψ ismeretében V(r) meghatározható leárnyékolt elektronra is igaz
H atomnál (nincs árnyékolás)

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \Rightarrow \xi(r) = \frac{e^2}{2 \cdot m_0^2 \cdot c^2} \cdot \frac{1}{r^3}$$ ***]***

Spin-pálya csatolás → energia függ *l* és s beállásától
→ Forgatónyomaték: *M* = *B_lxμ_s*
***l*, s → vektorok precesszálnak**
***j* = *l* + s → mozgásállandó**

$$j_z = l_z + s_z = \hbar \cdot m_j = \hbar \cdot m_l + \hbar \cdot m_s \Rightarrow m_j = m_l + m_s ; -j \le m_j \le j$$

$$\langle j^2 \rangle = \hbar^2 \cdot j \cdot (j+1)$$

j = l + ½ → párhuzamos beállás
j = l - ½ → ellentétes beállás
egyszerre megfigyelhető: $j^2, l^2, s^2, j_z = m_j \cdot \hbar$
(*l*, s → z-komponense a precesszió miatt nem mozgásállandó → s, *l*-nél határozott fázisviszonyok)
Pontosan: kvantummechanika
[Atommagoknál, kvarkrendszereknél stb. → hasonló spin-pálya tagok lépnek fel]

H atom finomfelhasadása:

- **mágneses tér nagysága**
  $V_{ls} \approx \mu_B \cdot B_l$
  kiszámítva: $B_l \approx 1$ Tesla → (~labormágn.)
- **(l . s) megbecslése** $\langle \underline{s} \cdot \underline{l} \rangle \approx \hbar^2$

Kiszámítva: $V_{ls} \approx 10^{-4}$ eV
kicsi: legkisebb gerjesztési energia ~ eV

$$\langle V_{ls} \rangle = \langle \underline{l} \cdot \underline{s} \rangle_{ljm_j} \cdot \langle \xi(r) \rangle_{nl}$$

$$\langle \underline{l} \cdot \underline{s} \rangle \Rightarrow \underline{j}^2 = (\underline{l} + \underline{s}) \cdot (\underline{l} + \underline{s}) = \underline{l}^2 + \underline{s}^2 + 2 \cdot \underline{l} \cdot \underline{s}$$

$$\Rightarrow \underline{l} \cdot \underline{s} = \frac{1}{2} \cdot \left(\underline{j}^2 - \underline{l}^2 - \underline{s}^2 \right); \langle \underline{j}^2 \rangle = j \cdot (j+1) \cdot \hbar^2$$

$$\langle \underline{l} \cdot \underline{s} \rangle = \frac{\hbar^2}{2} \left(j \cdot (j+1) - l \cdot (l+1) - s \cdot (s+1) \right);$$

$$s \cdot (s+1) = \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} = \frac{3}{4}$$

$$\Rightarrow \Delta E_{ls} = \left(j \cdot (j+1) - l \cdot (l+1) - \frac{3}{4} \right) \cdot \gamma_{nl}$$

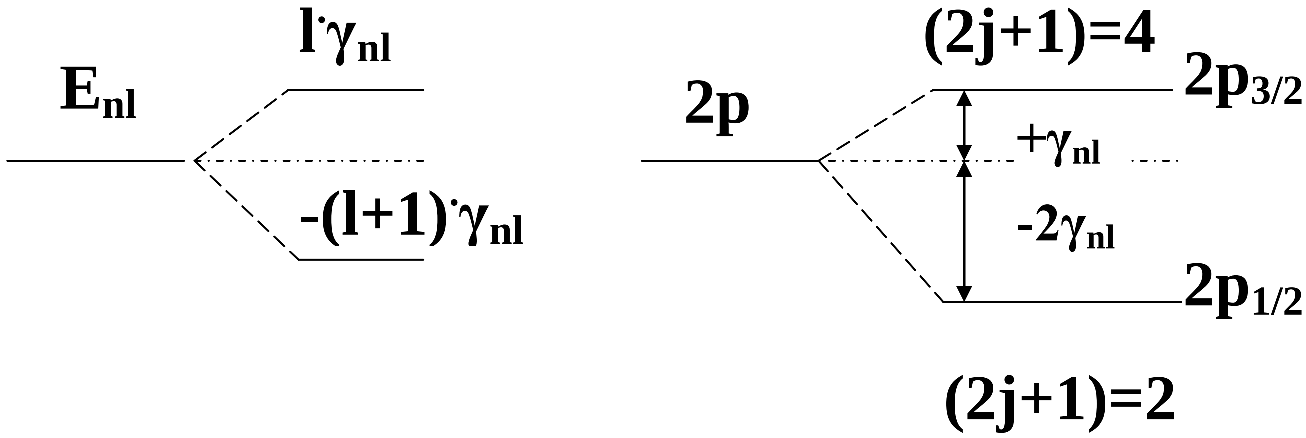
$$\gamma_{nl} = \langle \xi(r) \rangle_{nl} \cdot \frac{\hbar^2}{2}$$

$j \rightarrow l + \frac{1}{2} \rightarrow \Delta E_{l+1/2} = l \cdot \gamma_{nl}$

$j \rightarrow l - \frac{1}{2} \rightarrow \Delta E_{l-1/2} = -(l+1) \cdot \gamma_{nl}$

minden *$l \neq 0$* nívó két nívóra hasad

pl.: 2p (l=1) nívó



Általában igaz: j szerinti degenerációval súlyozva az energiákat → súlypont nem változik

$$\Rightarrow \gamma_{nl} = \frac{m_0 \cdot c^2}{4} \cdot (Z \cdot \alpha)^4 \cdot \frac{1}{n^3 \cdot l \cdot (l+1) \cdot \left(l + \frac{1}{2}\right)}; \alpha = \frac{e^2}{\hbar \cdot c}$$

Kísérlet:

- **nagyságrend jó ($\Delta E/E \sim 10^{-5}$)**
- **nincs egyezés**

Ok: relativisztikus korrekció kell

$$T=\left(\left(m_0\cdot c^2\right)^2+p^2\cdot c^2\right)^{\frac{1}{2}}-m_0\cdot c^2=\frac{p^2}{2\cdot m_0}-\frac{p^4}{8\cdot m_0^3\cdot c^3}+....=T_0+\Delta T$$

$\Delta T/T_0 \sim 10^{-5}$ (H-re)

nehéz atomokra nagyobb, ≤ 10%;

$$\Delta E_n=-\left\langle\frac{p^4}{8\cdot m_0^3\cdot c^2}\right\rangle$$

$$\Rightarrow \Delta E_{FS}=\Delta E_{ls}+\Delta E_{rel}=-\frac{1}{2}\cdot m_0\cdot c^2\cdot(Z\cdot\alpha)^4\cdot\frac{1}{n^3}\cdot\left\{\frac{1}{j+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4\cdot n}\right\}$$

≈ 1

→ a felhasadás nagyságát α határozza meg

α → finomszerkezeti állandó $\alpha=\frac{e^2}{\hbar\cdot c}\approx\frac{1}{137}$

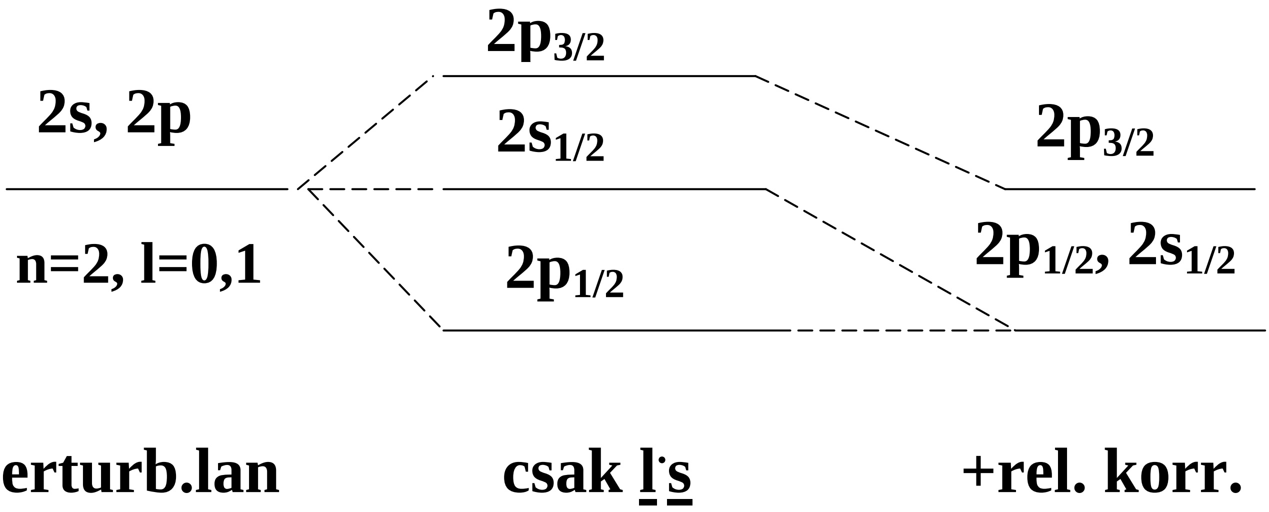
α dimenziótlan → az EM kölcsönhatás erősségére jellemző természetes egységben

ΔE_{FS} → csak j-től függ *(l-től nem függ)*

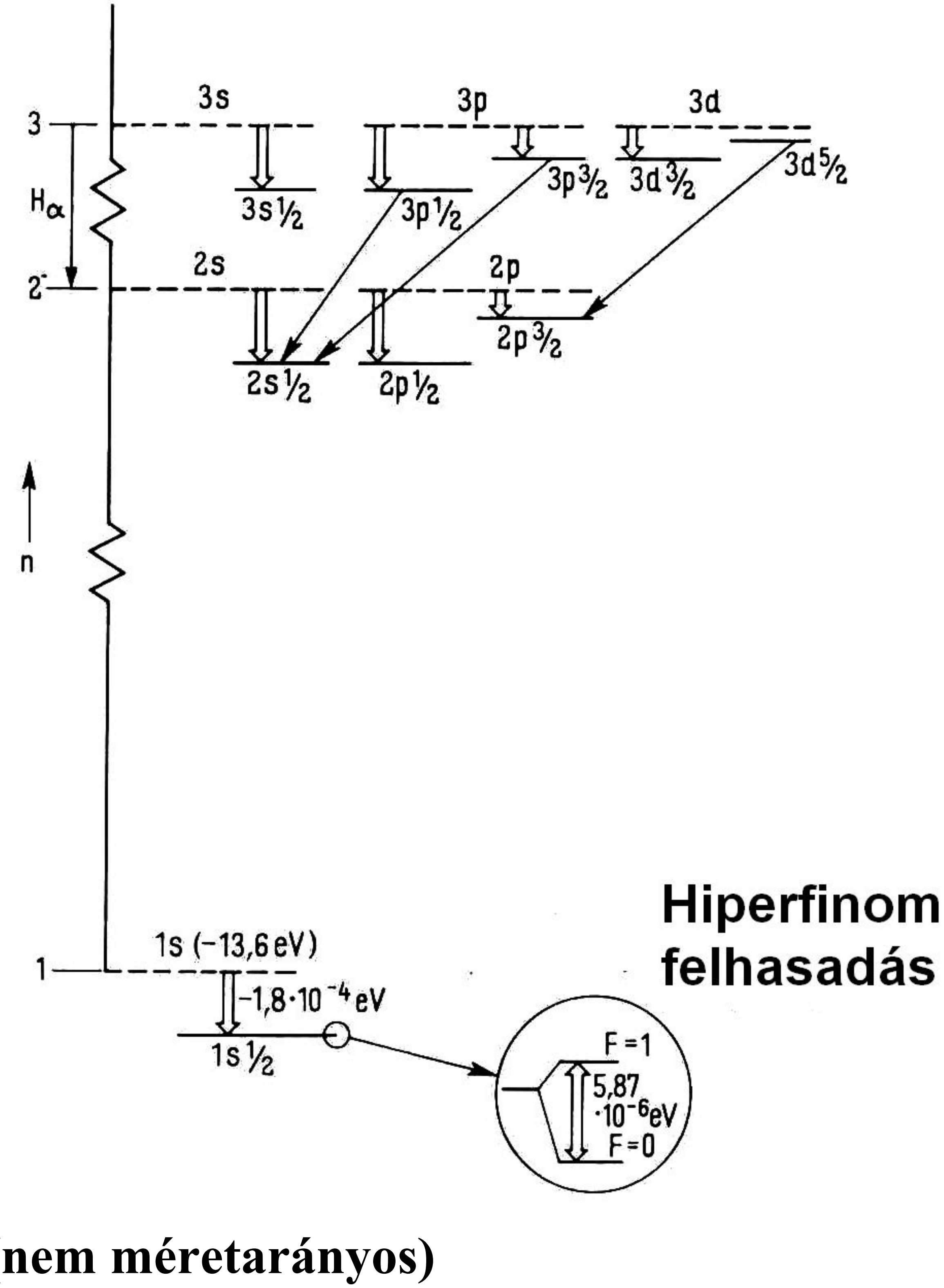
Ez a Dirac-elmélet eredménye

Dirac-egyenlet így írja le a H-t

Példa: 2s, 2p nívók H-ban



H. atom energiaszintjei:



(nem méretarányos)

3. A hiperfinom felhasadás

Ok: a mag és az elektronburok kölcsönhat

H-atom: proton mágneses momentuma és az elektron mágn. mom. hat egymásra

Becslés:

$$m_e = \frac{1}{1836} m_p ; \mu_B = \frac{e \cdot \hbar}{2 \cdot m_e \cdot c}$$

Proton → anomális mágneses momentum

$658 \cdot |\mu_p| = |\mu_{el}| \rightarrow g = 5.58$

A két momentum kölcsönhatása:

$$\Delta E_{HF} \sim \frac{\mu_1 \cdot \mu_2}{r^3}$$

$r \approx a_0/2 \rightarrow \Delta E_{HF} \approx 5 \cdot 10^{-6}$ eV $<< \Delta E_{ls}$

A spin-pálya energia sokkal nagyobb:

- **$\underline{l}$ és $\underline{s}$ csatolása marad**
- **a proton spinje $\underline{j}$-hez igazodik**

→ mag kicsi → az EM tér konstans

$\underline{B}_0$ → mágneses tér az elektrontól

$$\underline{B}_0 = -\overline{B}_0 \cdot \frac{\underline{J}}{j \cdot \hbar} ; \overline{B}_0 = \left| \int \Psi^*_{j,m_j=j} \underline{\underline{B}}_0 \Psi_{j,m_j=j} d\tau \right|$$

Az el. spinje és az általa létrehozott mágn. tér ellentétes irányúak

V_{HF}=-$\underline{\mu}_p$·$\underline{B}_0$ → a pr. spinje és $\underline{J}$ csatolódik

$$\underline{F} = \underline{s}_p + \underline{J}$$

$$\left\langle \underline{F}^2 \right\rangle = \hbar^2 \cdot F \cdot (F+1); F_z = m_F \cdot \hbar$$

H alapállapotra:

$$j = s = \frac{1}{2}; s_p = \frac{1}{2}$$

$$F = j \pm \frac{1}{2} = j \pm s_p$$

F=0 → ↑↓; F=1 → ↑↑

$$\underline{\mu}_p = g_p \cdot \mu_{MAG} \cdot \frac{\underline{s}_p}{\hbar} = \frac{\mu_p \cdot \mu_{MAG} \cdot \underline{s}_p}{\hbar \cdot s_p}$$

$$g_p = 5.58; \left|\mu_p\right| = 2.79 \cdot \mu_{MAG}$$

Innen:

$$V_{HF} = -\underline{\mu}_p \cdot \underline{B}_0 = \frac{\mu_p \cdot \mu_{MAG}}{s_p \cdot \hbar} \cdot \underline{s}_p \cdot \underline{J} \cdot \frac{\overline{B}_0}{\hbar \cdot j} =$$

$$= \frac{\mu_p \cdot \mu_{MAG} \cdot \overline{B}_0}{s_p \cdot j \cdot \hbar^2} \cdot \left(\underline{s}_p \cdot \underline{J}\right) = \frac{\mu_p \cdot \mu_{MAG} \cdot \overline{B}_0}{s_p \cdot j \cdot \hbar^2} \cdot \left(\underline{F}^2 - \underline{J}^2 - \underline{s}_p^2\right)$$

$$\Rightarrow \Delta E_{HF} = \left\langle V_{HF} \right\rangle = \frac{A}{2} \cdot \left[F \cdot (F+1) - j \cdot (j+1) - s \cdot (s+1)\right]$$

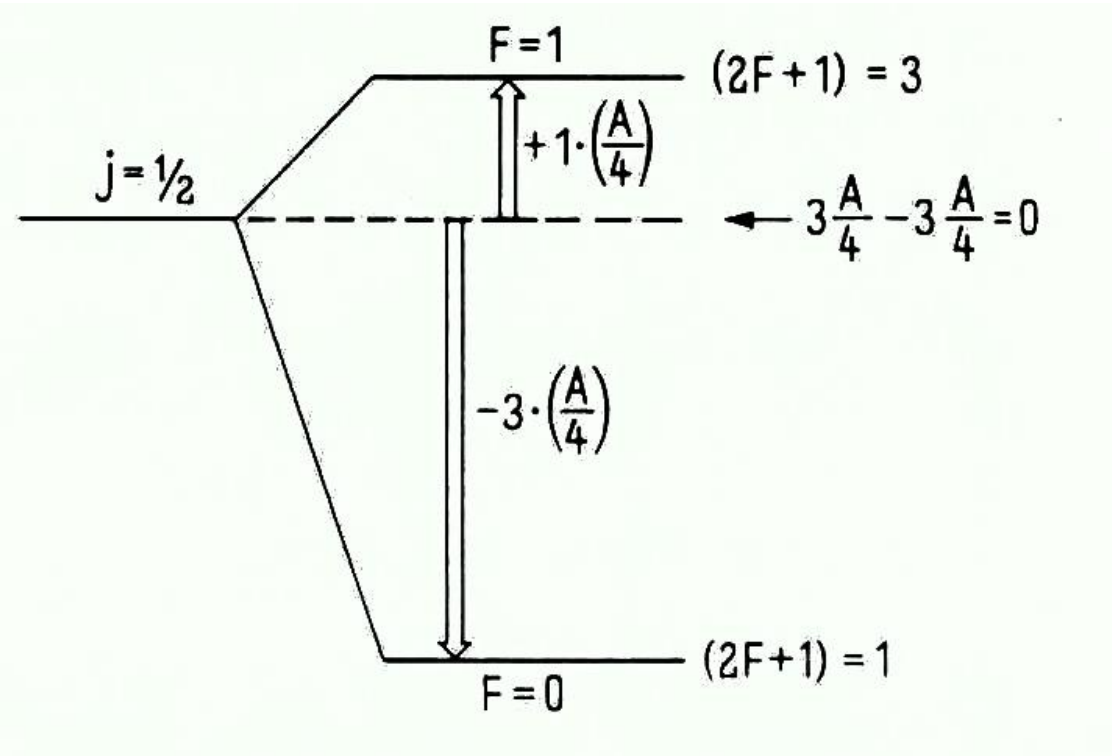
$$A = \frac{\mu_p \cdot \mu_{MAG} \cdot \overline{B}_0}{s_p \cdot j}$$ **(intervallumfaktor)**

H-atom (alapállapot):

$$s_p = j = \frac{1}{2} \Rightarrow A = 4 \cdot \mu_p \cdot \mu_{MAG} \cdot \overline{B}_0$$

$$F=1 \rightarrow \Delta E_{HF}^{(1)} = A/4$$

$$F=0 \rightarrow \Delta E_{HF}^{(1)} = -3 \cdot A/4$$



$\overline{B}_0$ → általában nehéz kiszámítani

Elektrodinamika: pl. tér a gömb közepén, ha a felület egyenletesen mágnesezett:

$$\underline{M}_{MÁGNESEZÉS} = \underline{\mu}_e \cdot \left|\Psi_{n0(r)}\right|^2$$

$$B_0 = \frac{8 \cdot \pi}{3} \int_0^{\infty} \left|\underline{M}\right| d\underline{r} = g_{el} \cdot \mu_B \cdot \frac{8 \cdot \pi}{3} \cdot \left|\Psi_{n0(r)}\right|^2$$

$$\left|\Psi_{n0(r)}\right|^2 = \frac{Z^3}{\pi \cdot a_0^3 \cdot n^3}$$

Kvantummechanika számolása szerint →

→ $\Delta E_{HF\ (n=1,\ j=1)} = h \cdot 1418.9\ MHz$

Kísérlet: mikrohullámú tartomány

$\nu_{kís}$ = 1420.2 MHz

Ez a λ = 21 cm-es sugárzás!

Rádiócsillagászat méri: az ionoszféra átengedi

Nincs egyezés!

→ Hiányzik még egy korrekció!

$g_{el} \approx 2$ → nem egészen pontosan

a Dirac-elmélet eddig ír le jól

4. A Lamb-féle vonaleltolódás

Itt: vázlat → pontosan a kvantumelektro-dinamika tárgyalja

[WILLIS EUGEN LAMB (1913-2008), Nobel-díj: 1955]

A jelenség fontos → EM kölcsönhatás általános szerkezetével kapcsolatos

Láttuk: részecske-hullám dualizmus → mikrofizikában ált. jelenség

EM tér kvantumtulajdonságai → kv.el.din.

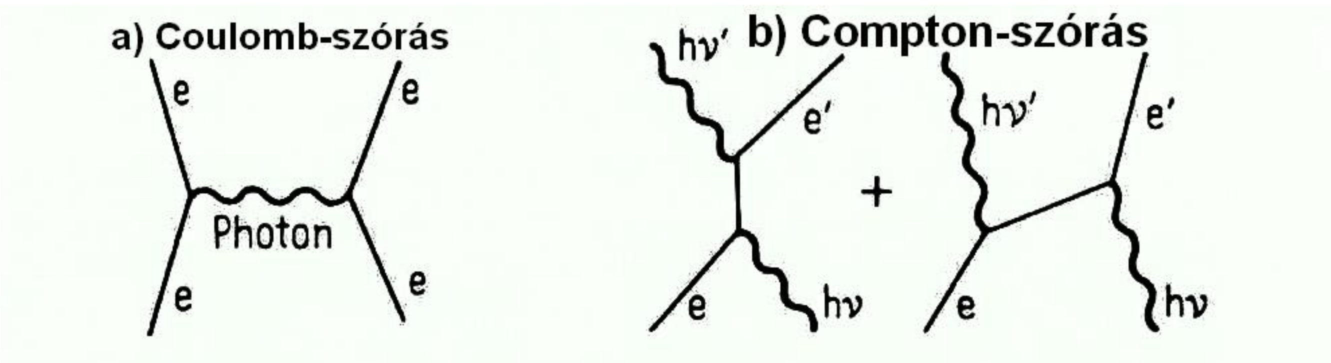
EM kölcsönhatás: fotonok emissziója és abszorpciója → kicserélődési jelleg (fotonok cseréje)

Töltött részecske körül: állandóan fotonok emissziója és abszorpciója

Pl.: e → e + foton → e

$\Delta E \cdot \Delta t \sim \frac{\hbar}{2}$ **→ megengedi → virtuális foton**

Kölcsönhatás: virtuális fotonok cseréje



(Cb. törvény helyfüggése) (ampl. Klein-Nishina-hoz)

Képben: magasabb rendű effektusok →
virtuális e^- e^+ párkeltés *(vákuum-polarizáció)*

Eredmény:
→ az effektív töltés a térforrás körül kisebb
→ *Cb. törvény nagy r-re igaz, de → kis távolságon eltérés van*

Atomfizikai konzekvenciák:

- **$g_{el} \neq 2$ (nem pontosan 2, ~10^{-6} eltérés)**
- **$2s_{1/2}$ és a $2p_{1/2}$ nívók felhasadnak a H-atomnál → Lamb-eltolódás (Lamb-shift)**

Most a H atom $2s_{1/2}$ és a $2p_{1/2}$ nívóinak felhasadásával foglalkozunk

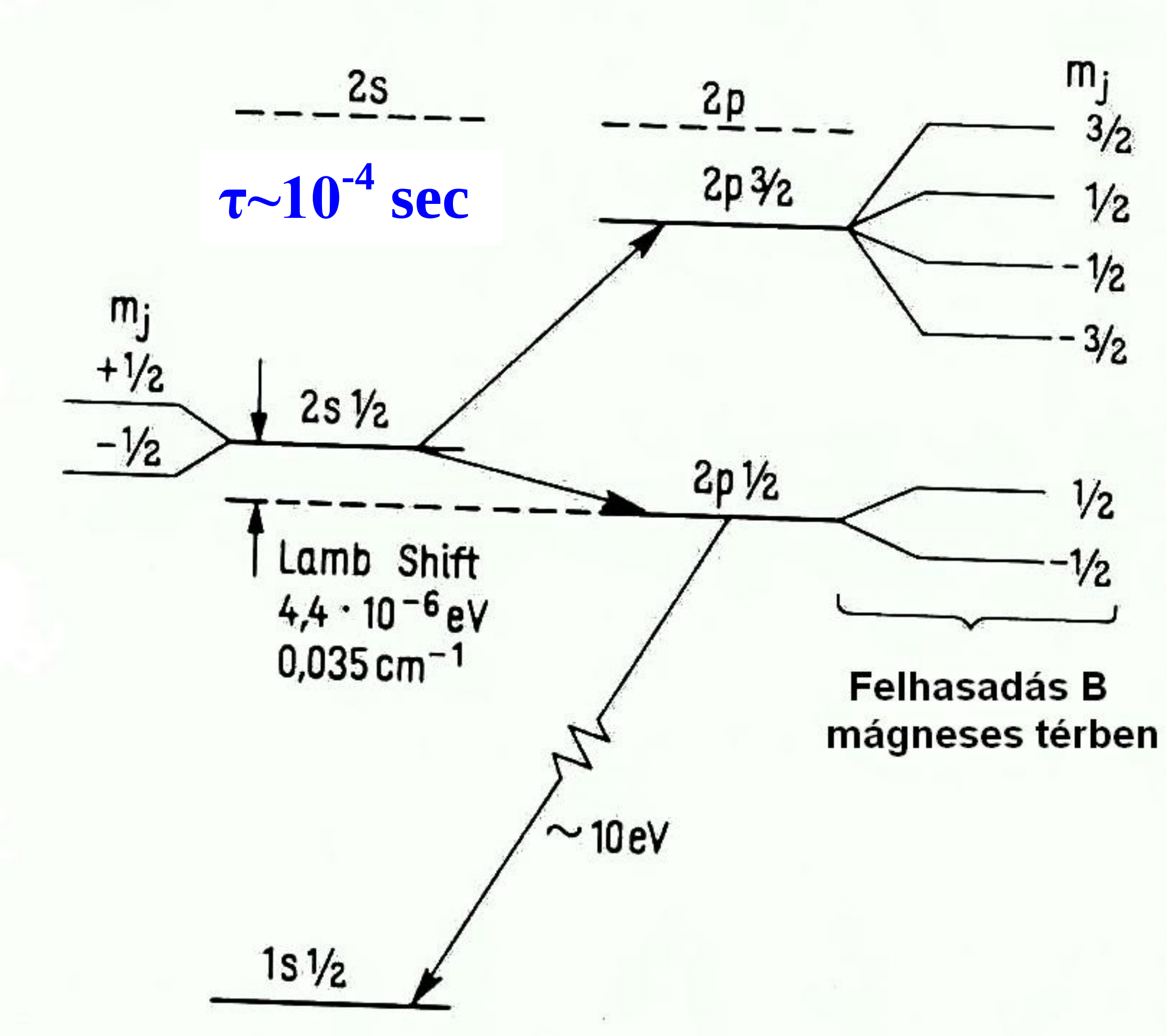
Kimutatás → csak igen pontos kísérlettel lehetséges

→ Lamb-Retherford kísérlet (1947)

A felhasadás fizikai oka: s állapot → <u>0</u> imp. mom. → nagy sűrűség kis távolságokon

Az s állapotra az effektív töltés kisebb
→ $E_s < E_p$ (a $2s_{1/2}$ és a $2p_{1/2}$ nívóknál)
$\Delta E_{2s1/2 \text{ és a } 2p1/2} \sim 10^{-6}$ eV

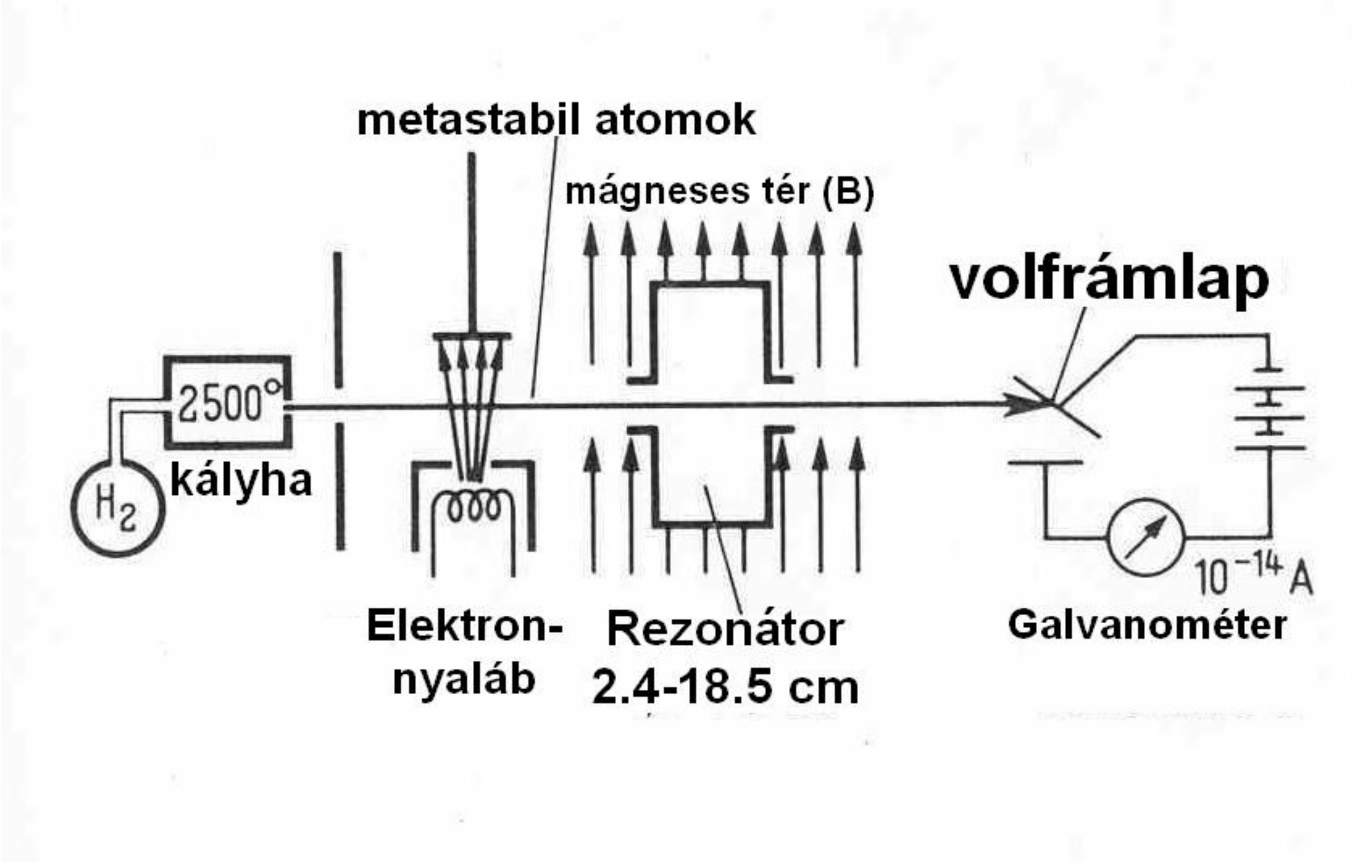
Kísérlet: nagyfrekvenciás módszer, *optikai úton igen nehéz*



(<u>B</u> térre szükség van → már kis el. tér is s-p átmenetet okoz)

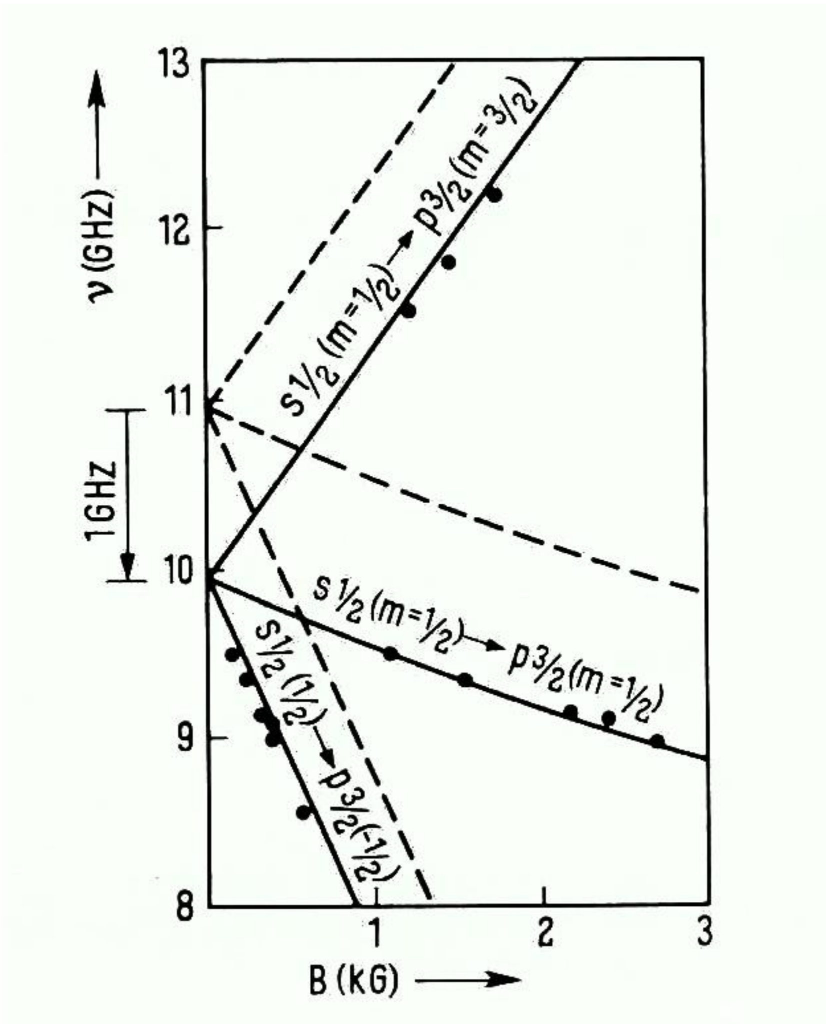
$2s_{1/2}$ – $1s_{1/2}$ átmenet tiltott, *mert $\Delta j = 0$*

2p – 1s megengedett



Lényeges: ha el nem bomlott 2s1/2 állapotú H érkezik az a volfrámból az elektront vált ki

Mérendő: ν frekvencia (B minimális elektron áram)

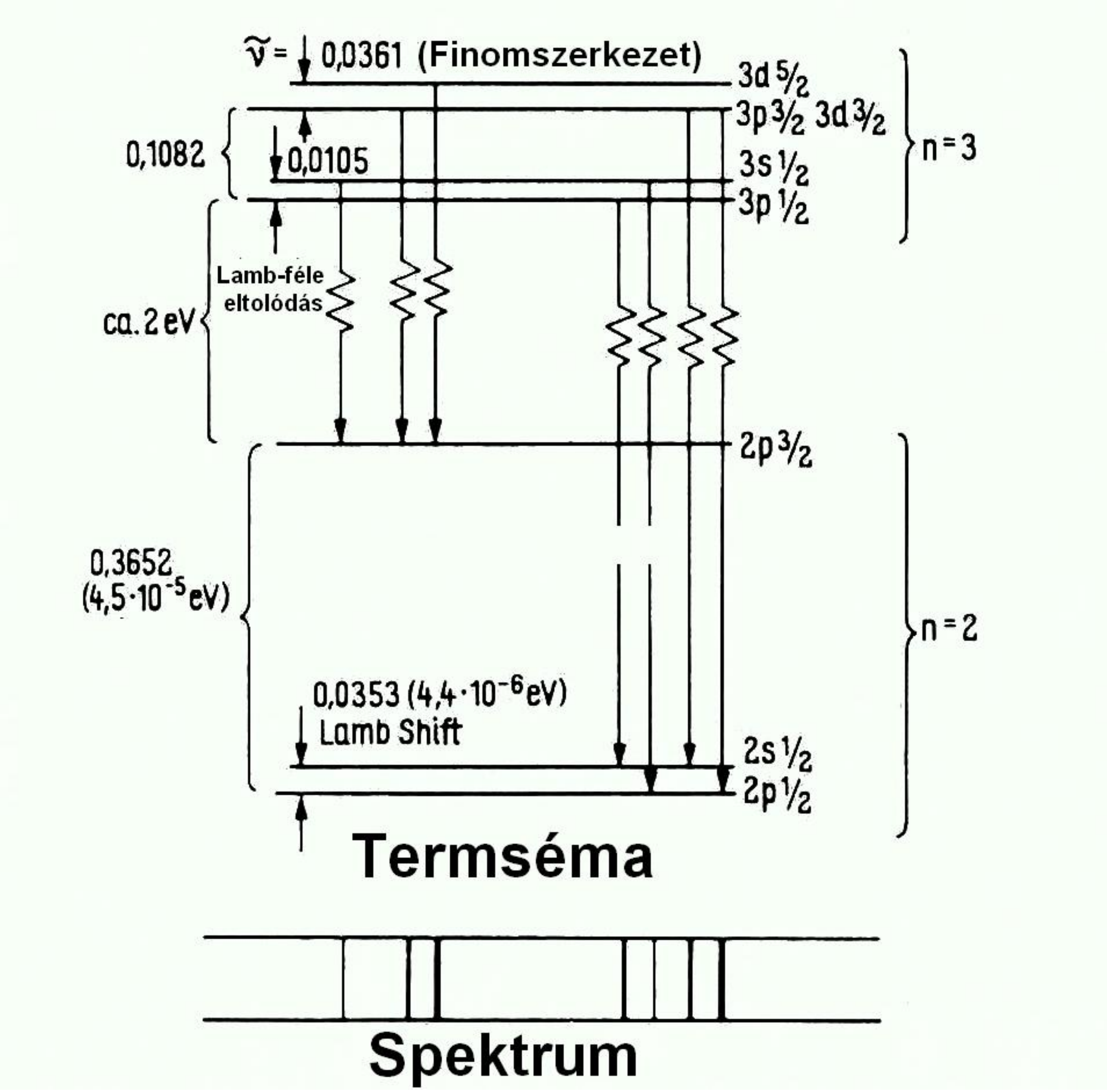


-------- **számolás vákumpolarizáció nélkül**

●●● mérések eredménye ***vákuumpolarizációval***

→: kiváló egyezés

Vizsgált a H_α-vonal: n_1=2, n_2=3,
a Balmer-sor első tagja → $\lambda_{H\alpha}$ = 656.28 nm



A H-atom spektrumát a kísérleti pontosságig tökéletesen értjük!

2.4. A TÖBBELEKTRONOS ATOMOK

1. A többelektronos atomok és ionok elektronszerkezetének empirikus vonatkozásai

2. Atomok Röntgen-spektruma

3. Összetett atomok és ionok spektruma

Cél: fizikai háttér megbeszélése

Korrekt tárgyalás: kvantummechanika és kvantum-elektrodimnamika

Elvileg:

- **jó elmélet**
- **soktestprobléma nehézségei**

1. A többelektronos atomok és ionok elektronszerkezetének empirikus vonatkozásai

Megértendő:

- **alapállapot tulajdonságai**
- **gerjesztett állapotok rendszere**

A megértésnél a koncepció: elektronokból álló felépítés; az elektron-állapotok fizikai valósága *(láttuk, pl. el.-atom ütközéseknél)*

Az elektronszerkezetet alakító tényezők:

1. **Cb. vonzás mag ─ el.-ok között**
2. ***Cb. taszítás el.-ok között***
3. ***Spin-pálya energiák***
4. **Spin-spin (el.-é) mágn. mom. kölcshat.**
5. **El.ok pályájából adódó mágn. momentumok KH.**
6. **El. spin ─ magspin KH.**
7. **El. pályamom. ─ magspin KH.**
8. **Relativisztikus korrekciók**
9. **Hullámfüggvény antiszimmetriájából következő energiaeltolódások** *(→ Pauli elv + határozatlansági. reláció következménye → kvantummechanika)*

Általában nehéz feladat: centrális tér + maradékkölcsönhatás
Ebben fontosak: 9, 2 (elhagyott rész), 3 (nagy Z-re fontos)