

4. Finomszerkezet

A különböző elemek spektrumának alapos vizsgálata a szinképvonalak nagy részének multiplicitására, illetve finomszerkezetére utal: egy-egy spektrumvonal több komponensből áll. A termék felhasadása a spin és a pályaimpulzusnyomaték kölcsönhatásának a következménye.

A hidrogénszerű atomok termjeinek kifejezését az említett kölcsönhatás figyelembe vételével Dirac adta meg:

$$T = Z^2 \frac{R}{n^2} + Z^4 \frac{\alpha^2 R}{n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right),$$

ahol Z a rendszám, R a Rydberg-állandó, α a finomszerkezeti állandó, n a főkvantumszám, j az atom teljes impulzusnyomatékát jellemző belső kvantumszám.

Feladatok:

479. A Bohr-féle atommodell alapján határozzuk meg a spin - pálya kölcsönhatás maximális mágneses energiáját a hidrogénatom alapállapotában.

480. A Dirac-féle finomszerkezeti összefüggés alapján határozzuk meg a spin-pálya kölcsönhatás maximális energiáját. Hasonlítsuk össze eredményünket az előző feladat megoldásával.

481. A Dirac-féle finomszerkezeti összefüggés alapján mutassuk ki, hogy a hidrogénszerű atomokban az azonos főkvantumszámhoz, de különböző mellékvantumszámhoz tartozó energianívók között találhatók egyenlő energiájú nívópárok. Melyek ezek pl. a 3s, 3p és 3d elektronállapotok* esetén?

482. Ábrázoljuk grafikusan az $n = 3$ főkvantumszámmal jellemzett állapotban levő egyszeresen ionizált He-atom termjeit. Adjuk meg a termék közötti különbséget hullámszámban és energetikai skálán mérve.

483. He^+ , Li^{++} , B^{+++} ionokat az $n = 3$ főkvantumszámmal jellemzett állapotba gerjesztettük. Határozzuk meg ebben az állapotban a legnagyobb termintervallumot mindhárom ion esetén.

484. Egyszeresen ionizált He-atomban az elektron az $n = 3$ főkvantumszámu állapotból az $n = 2$ főkvantumszámmal jellemzett állapotba megy át. Határozzuk meg,

- milyen $3 \rightarrow 2$ átmenetek lehetségesek;
- a multipllett spektrumvonal szélső komponensei közti hullámhosszkülönbséget.

485. Kétszeresen ionizált Li-atomban az elektron az $n = 4$ főkvantumszámu állapotból az $n = 3$ főkvantumszámmal jellemzett állapotba kerül. Határozzuk meg,

- milyen $4 \rightarrow 3$ átmenetek lehetségesek;
- a multipllett spektrumvonal szélső komponensei közti hullámszám-különbséget.

* Az elektronállapotokat a továbbiakban is a főkvantumszám után irt kis s, p, d, ... szimbólummal jellemezzük, de feltüntetjük indexként a belső kvantumszám értékét is. Pl. a $3p_{1/2}$ az elektronnak az $n = 3, l = 1$ és $j = 1/2$ kvantumszámokkal jellemzett állapotát jelenti.

Az atom állapotát továbbra is nagy S, P, D, ... betűkkel jelöljük, az index itt is a belső kvantumszám értékét adja, de a szimbólum baloldalán fent a term dublett voltára is utalunk egy 2 számjeggyel. Tehát $^2P_{3/2}$ azt jelzi, hogy a P term dublett és $j = 3/2$.

$$\Delta W = \mu H \cos \alpha$$

menyiséggel változik, ahol μ a mágneses momentum, H a mágneses erőter abszolút értéke, α μ és H által bezárt szög. Az energia tehát akkor maximális, ha a mágneses momentum és a mágneses erőter párhuzamos ($\cos \alpha = +1$). Miután a H erőter a pálya mágneses momentuma révén lép fel, a μ mágneses momentumként fogható fel. Ekkor

$$\Delta W_{\max} \cong \frac{\mu_B^2}{r_1} = 3,6 \cdot 10^{-4} \text{ eV},$$

ahol μ_B a Bohr-magneton, r_1 az első Bohr-féle pálya sugara.

480. A spin-pálya kölcsönhatási energiát a Dirac-féle finomszerkezeti összefüggés második tagja adja:

$$\Delta W = \frac{\alpha^2 R Z^4}{n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right),$$

ΔW maximális j minimális értékénél ($j = 1/2$) és a $\frac{d}{dn} (\Delta E) = 0$ feltételből meghatározható n értéknél. Ebben az állapotban ($j = 1/2$, $n = 1$) a spin-pálya kölcsönhatási energia

$$W_{\max} = 1,81 \cdot 10^{-4} \text{ eV}.$$

481. Miután az $^2S_{1/2}$ és $^2P_{1/2}$, valamint a $^2P_{3/2}$ és $^2D_{3/2}$ termek főkvantumszáma és belsőkvantumszáma páronként azonos, energiájuk is megegyezik.

$$482. 1,734 \cdot 10^{-2} \text{ m}^{-1} \text{ és } 0,577 \cdot 10^{-2} \text{ m}^{-1}; 3,44 \cdot 10^{-23} \text{ J és } 1,15 \cdot 10^{-23} \text{ J}.$$

483. A feladatban jelölt állapotban a legmélyebb energiájú term a $3s_{1/2}$, a legmagasabb a $3d_{5/2}$. A termintervallumok:

$$\text{He}^+ - 2,31 \cdot 10^{-2} \text{ m}^{-1}, \text{Li}^{++} - 11,69 \cdot 10^{-2} \text{ m}^{-1}, \text{Be}^{+++} - 36,96 \cdot 10^{-2} \text{ m}^{-1}.$$

484. a) A 118. ábrán feltüntetettük a lehetséges átmeneteket, amelyeket az ℓ mellékvantumszámra és a j belsőkvantumszámra vonatkozó kiválasztási szabály alapján határozhatunk meg: $\Delta \ell = \pm 1$; $\Delta j = 0 \pm 1$. Ennek

479. Az atom energiája mágneses erőterben

alapján és a Dirac-féle finomszerkezeti összefüggés felhasználásával a lehetséges átmenetek és a nekik megfelelő hullámhossz:

$$3p_{3/2} - 2s_{1/2}, \quad \lambda_1 = 1640,107 \text{ \AA} ;$$

$$3s_{1/2} - 2p_{1/2}, \quad \lambda_2 = 1640,154 \text{ \AA} ;$$

$$3d_{5/2} - 2p_{3/2}, \quad \lambda_3 = 1640,249 \text{ \AA} ;$$

$$3d_{3/2} - 2p_{3/2}, \quad \lambda_4 = 1640,265 \text{ \AA} ;$$

$$3s_{1/2} - 2p_{3/2}, \quad \lambda_5 = 1640,368 \text{ \AA} .$$

b) A multipliett spektrumvonal két szélső komponense (az ábrán vastag nyíllal jelzett) λ_1 és λ_5 ; $\Delta \lambda = 0,261 \text{ \AA}$.

$$485.5 \text{ \AA} \text{ átmenet; } \Delta T = 2,08 \cdot 10^{-2} \text{ m}^{-1}.$$