

ЯДЕРНЫЕ СТЕПЕНИЯ СВОБОДЫ В АТОМНОЙ ФИЗИКЕ

Е.В. Грызлова

НИИЯФ МГУ
Весенний семестр 2020 г.

- «Разминка»
- Спектры систем со сферической симметрией
- **Сжатые атомы и резонансы формы**
- **Двухуровневая система с сильно связанными состояниями**
- **Атомная спектроскопия антипротония**
- **Поляризация излучения и дихроизм**
- **Плоская волна и волновой пакет – волна вещества.**
- **Нобелевская премия по физике 2012 года.**
Изучение одиночной квантовой системы
- **Ионные ловушки**
- **Когерентные и сжатые состояния волновых пакетов**
- **Начала теории рассеяния**
- **Особенности резонансного рассеяния и неэкспоненциальный распад**

2. Системы со сферической симметрией:

а) Квантование трехмерной ямы, исчезновение уровней.

Особенности граничных условий

Асимптотика

б) физический пример трехмерной ямы – эндоэдральное соединение:

Фуллерены

Эндоэдральные соединения

Дифракция рентгеновских лучей

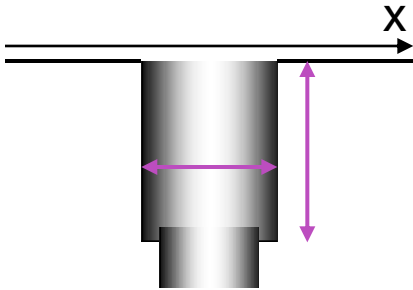
ЭПР

Перестройка спектров

Квантование одномерной потенциальной ямы

Одномерная потенциальная яма конечной глубины

- ✓ Всегда ли есть дискретный уровень?
- ✓ Как изменяется число уровней при изменении ширины/глубины ямы?
- ✓ Где локализована волновая функция частицы?



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = E \cdot \varphi(\vec{r})$$

$\hbar = 1, m = 1$ - атомная система единиц

$$-\frac{1}{2} \Delta \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = E \cdot \varphi(\vec{r})$$

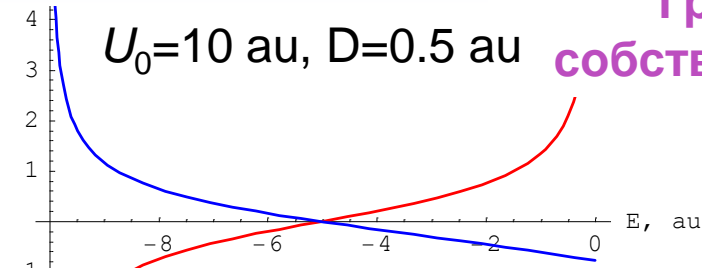
$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E \cdot \varphi(x)$$

$$V(x) = \begin{cases} U, & 0 < x < D \\ 0 \end{cases}$$

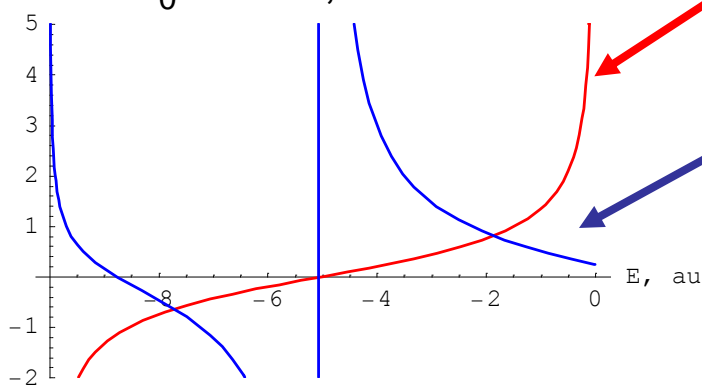
Квантование одномерной потенциальной ямы

Графическое решение уравнения на собственные значения для одномерной ямы

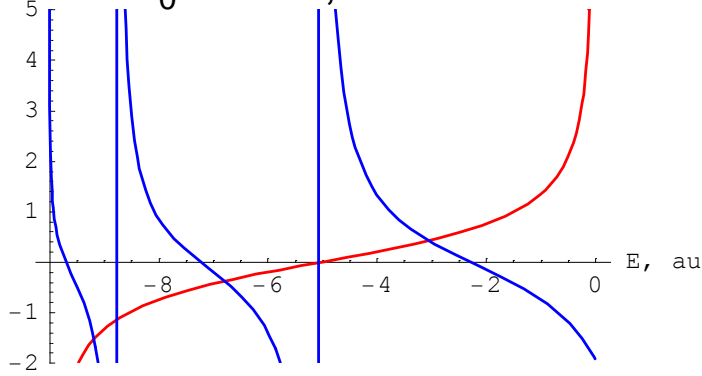
$U_0=10$ au, $D=0.5$ au



$U_0=10$ au, $D=1$ au



$U_0=10$ au, $D=2$ au



$$\frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1k_2} = \text{ctg}(k_2 \cdot d)$$

где волновые вектора - действительны

$$k_1 = \sqrt{-2 \cdot E}, k_2 = \sqrt{2 \cdot (E - U_0)}$$

$$\frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1k_2} = \frac{2E - U_0}{\sqrt{-E} \sqrt{E - U_0}} \rightarrow \begin{cases} \infty, & E \rightarrow 0 \\ -\infty, & E \rightarrow U_0 \end{cases}$$

Функция монотонно растет в области определения

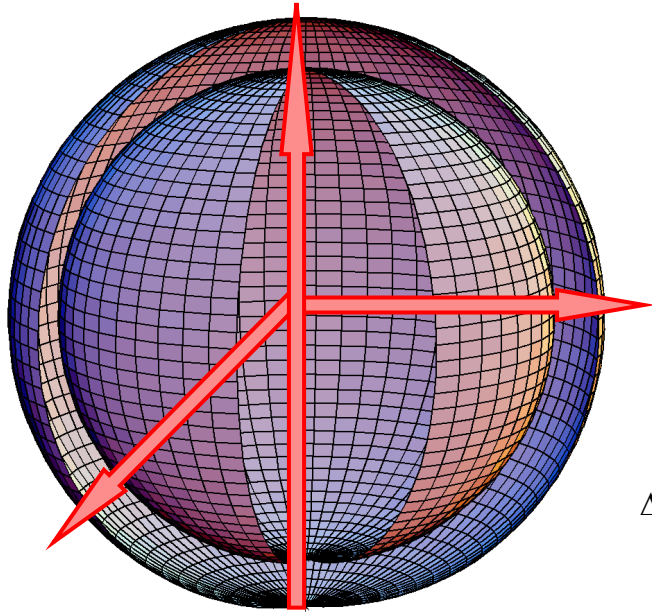
$$\text{ctg}(k_2 d) = \text{ctg}(\sqrt{2(E - U_0)} d) \rightarrow \begin{cases} \text{ctg}(\sqrt{-2U_0} d), & E \rightarrow 0 \\ \infty, & E \rightarrow U_0 \end{cases}$$

Функция падает до фиксированного значения в нуле

Обязательно есть хотя бы одно решение

Квантование трехмерной потенциальной ямы

Разделение переменных в системах со сферической симметрией



$$-\frac{1}{2} \Delta \varphi(\vec{r}) + V(r)\varphi(\vec{r}) = E \cdot \varphi(\vec{r})$$

Исключаем угловые переменные

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

$$\varphi(\vec{r}) = \tilde{\varphi}(r) Y_{lm}(\vec{r}/r)$$

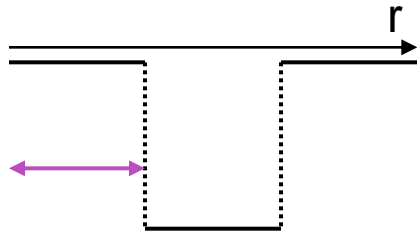
$$-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2 \cdot \partial}{r \cdot \partial r} \right) \tilde{\varphi}(r) + V(r)\tilde{\varphi}(r) + \frac{l(l+1)}{2 \cdot r^2} \tilde{\varphi}(r) = E \cdot \tilde{\varphi}(r)$$

$$\psi(r) = r \cdot \tilde{\varphi}(r)$$

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi(r) + V(\vec{r}) \cdot \psi(r) + \frac{l(l+1)}{2 \cdot r^2} \psi(r) = E \cdot \psi(r)$$

$$V(r) = \begin{cases} U, & R_1 < r < R_2 \\ 0 \end{cases}$$

Квантование трехмерной потенциальной ямы



$$-\frac{1}{2} \Delta \varphi(\vec{r}) + V(r) \varphi(\vec{r}) = E \cdot \varphi(\vec{r})$$

$$V(r) = \begin{cases} U, & R_1 < x < R_2 \\ 0 \end{cases}$$

$$\varphi(\vec{r}) = \tilde{\varphi}(r) Y_{lm}(\vec{r}/r)$$

$$\psi(r) = r \cdot \tilde{\varphi}(r)$$

Сферическая потенциальная яма конечной глубины

- ✓ Всегда ли есть дискретный уровень?
- ✓ Как изменяется число уровней при изменении ширины/глубины ямы?
- ✓ Где локализована волновая функция частицы?

Исключаем угловые переменные

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2 \cdot \partial}{r \cdot \partial r} \right) \tilde{\varphi}(r) + V(r) \tilde{\varphi}(r) + \frac{l(l+1)}{2 \cdot r^2} \tilde{\varphi}(r) = E \cdot \tilde{\varphi}(r)$$

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi(r) + V(\vec{r}) \cdot \psi(r) + \frac{l(l+1)}{2 \cdot r^2} \psi(r) = E \cdot \psi(r)$$

S-СОСТОЯНИЕ

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi(r) + V(\vec{r}) \cdot \psi(r) = E \cdot \psi(r)$$

Уравнение совпадает с одномерным случаем. Совпадает ли спектр?

Граничные условия для трехмерной системы

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2 \cdot \partial}{r \cdot \partial r} \right) \tilde{\varphi}(r) + V(r) \tilde{\varphi}(r) + \frac{l(l+1)}{2 \cdot r^2} \tilde{\varphi}(r) = E \cdot \tilde{\varphi}(r)$$

$$\hat{p}_r = -i \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \quad \text{- вид оператора импульса в сферической системе координат}$$

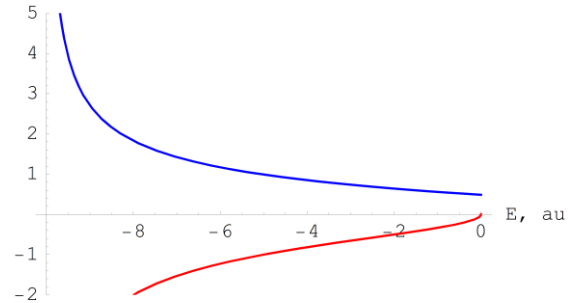
Условие эрмитовости оператора импульса:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \tilde{\varphi}(r) | \hat{p}_r | \tilde{\varphi}(r) \rangle - \langle \tilde{\varphi}(r) | \hat{p}_r | \tilde{\varphi}(r) \rangle^* = \int_0^\infty r^2 (\tilde{\varphi}^*(r) \hat{p}_r \tilde{\varphi}(r) - \tilde{\varphi}(r) \hat{p}_r \tilde{\varphi}^*(r)) dr = \\ &= -i \int_0^\infty r^2 (\tilde{\varphi}^*(r) \frac{\partial}{\partial r} \tilde{\varphi}(r) + \tilde{\varphi}(r) \frac{\partial}{\partial r} \tilde{\varphi}^*(r) + \frac{2}{r} \tilde{\varphi}^*(r) \tilde{\varphi}(r)) r^2 dr = \\ &= -i \int_0^\infty (r^2 \frac{\partial}{\partial r} |\tilde{\varphi}(r)|^2 + 2r |\tilde{\varphi}(r)|^2) dr = \\ &= -i \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial r} r^2 |\tilde{\varphi}(r)|^2 dr = -i r^2 |\tilde{\varphi}(r)|^2 \Big|_0^\infty \end{aligned}$$

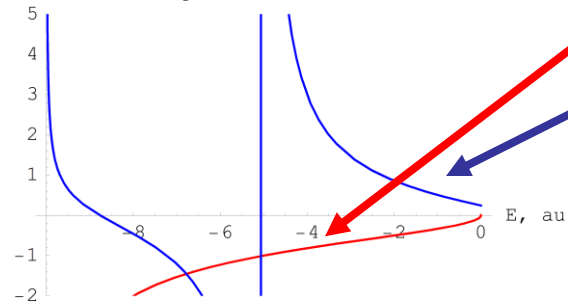
$$\psi(r) = r \cdot \tilde{\varphi}(r) \quad \psi(0) = 0$$

Исчезновение уровней в трехмерной системе

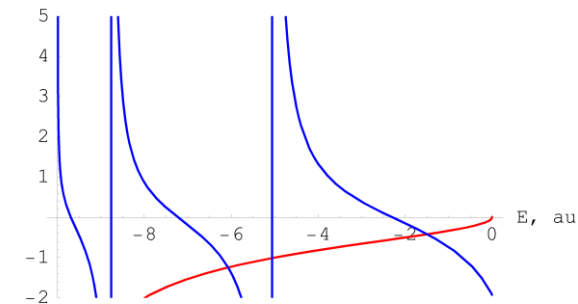
$U_0=10$ au, $D=0.25$ au **Графическое решение уравнения на собственные значения для трехмерной ямы**



$U_0=10$ au, $R=1$ au



$U_0=10$ au, $R=2$ au



$$-\frac{k_2}{k_1} = \text{ctg}(k_2 \cdot R)$$

$$\frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1k_2} = \text{ctg}(k_2 \cdot d)$$

где волновые вектора - действительны

$$k_1 = \sqrt{-2 \cdot E}, k_2 = \sqrt{2 \cdot (E - U_0)}$$

$$-\frac{k_2}{k_1} = -\frac{\sqrt{-E}}{\sqrt{E - U_0}} \rightarrow \begin{cases} 0, & E \rightarrow 0 \\ -\infty, & E \rightarrow U_0 \end{cases}$$

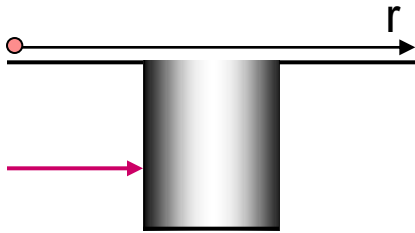
Функция монотонно растет в области определения

$$\text{ctg}(k_2 d) = \text{ctg}(\sqrt{2(E - U_0)}d) \rightarrow \begin{cases} \text{ctg}(\sqrt{-2U_0}d), & E \rightarrow 0 \\ \infty, & E \rightarrow U_0 \end{cases}$$

Функция падает до фиксированного значения в нуле

Решение есть если $2U_0R^2 > \pi^2/4$

Поведение волновой функции в начале координат



$$V(r) = \begin{cases} U, & R_1 < x < R_2 \\ 0 \end{cases}$$

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi(r) + V(\vec{r}) \cdot \psi(r) + \frac{l(l+1)}{2 \cdot r^2} \psi(r) = E \cdot \psi(r)$$

$$\psi(r) = r^s (1 + a_1 r + \dots)$$

$$s(s-1) - l(l+1) = 0$$

$$s = l+1, \quad s = -l$$

Регулярное и нерегулярное в начале координат решение

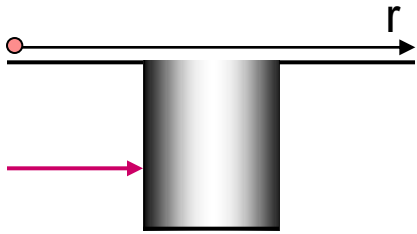
Решения при $r \rightarrow \infty$

~~$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi(r) + V(\vec{r}) \cdot \psi(r) + \frac{l(l+1)}{2 \cdot r^2} \psi(r) = E \cdot \psi(r)$$~~

$$\psi(r) \sim e^{\pm \sqrt{2Er}} \quad \psi(r) \sim \cos \sqrt{2Er}, \quad \sin \sqrt{2Er}$$

Если $E < 0$ то регулярное решение экспоненциально растет на бесконечности кроме некоторых значений E , если $E > 0$ то осциллирует

Волновые функции трехмерной потенциальной ямы



$$V(r) = \begin{cases} U, & R_1 < x < R_2 \\ 0 & \end{cases}$$

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi(r) + V(\vec{r}) \cdot \psi(r) + \frac{l(l+1)}{2 \cdot r^2} \psi(r) = E \cdot \psi(r)$$

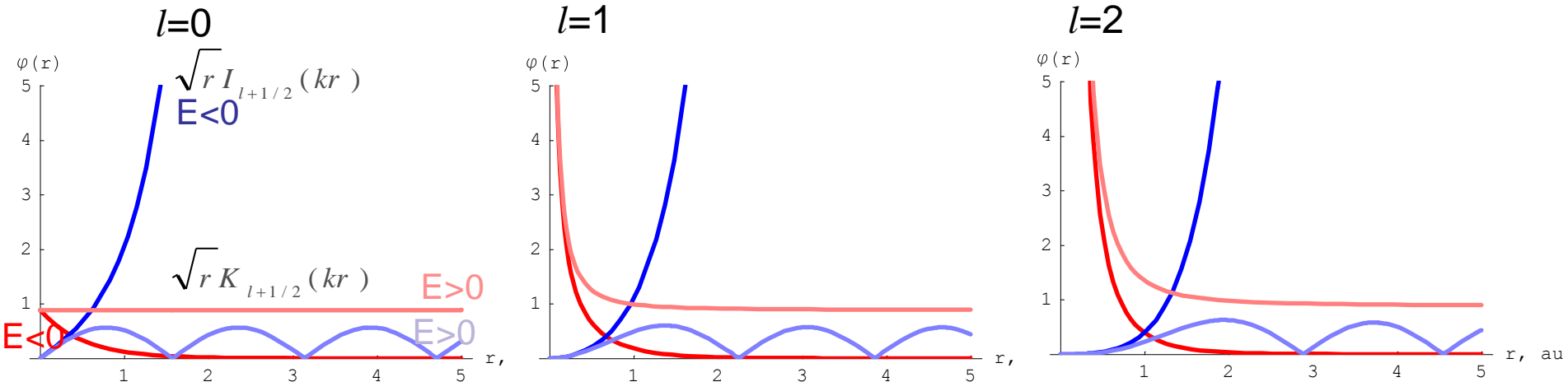
Сферическая потенциальная яма конечной глубины

Два линейно независимых решения

$$\sqrt{r} I_{l+1/2}(kr) \quad \sqrt{r} K_{l+1/2}(kr)$$

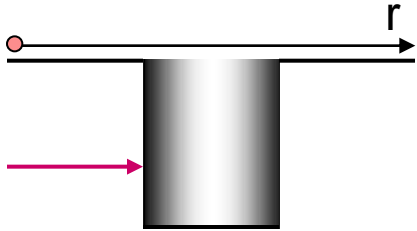
модифицированная функция Бесселя первого и второго рода (Инфельда и МакДональда)

Модуль волновой функции вероятности.



Волновые функции трехмерной потенциальной ямы

Сферическая потенциальная яма конечной глубины



$$V(r) = \begin{cases} U, & R_1 < x < R_2 \\ 0 & \end{cases}$$

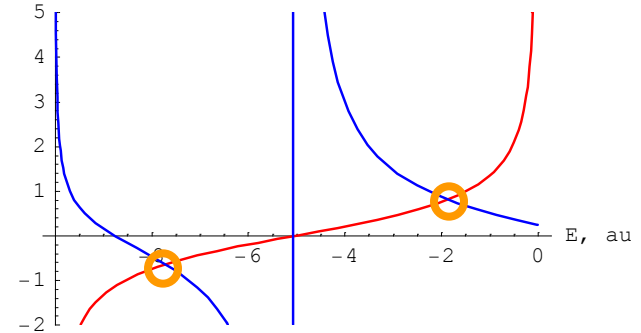
$$R_1 = 1 \text{ au}, R_2 = R_1 + 1 \text{ au}, U_0 = -10 \text{ au}$$

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi(r) + V(\vec{r}) \cdot \psi(r) + \frac{l(l+1)}{2 \cdot r^2} \psi(r) = E \cdot \psi(r)$$

одномерная
 $U_0 = 10 \text{ au}, D = 1 \text{ au}$

$$E_1 = -7.70$$

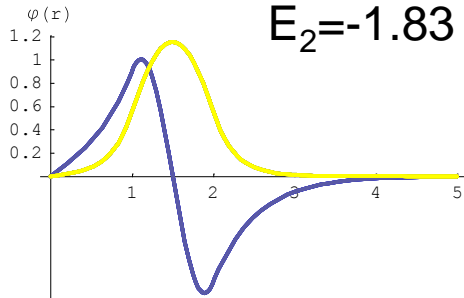
$$E_2 = -1.86$$



$l=0$

$$E_1 = -7.70$$

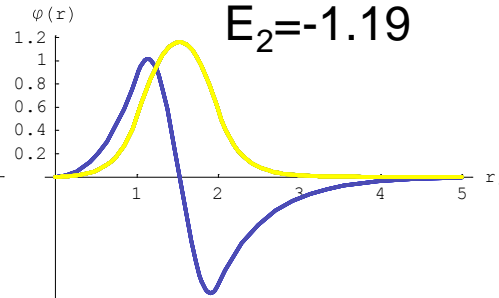
$$E_2 = -1.83$$



$l=1$

$$E_1 = -7.21$$

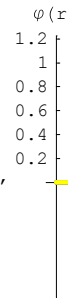
$$E_2 = -1.19$$



$l=2$

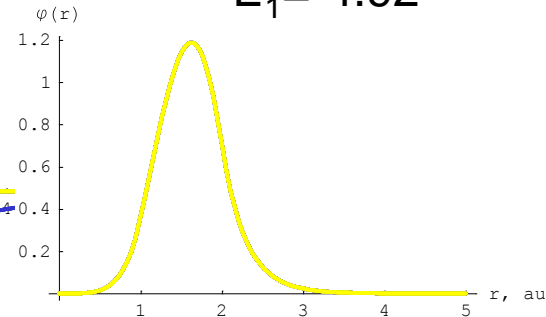
$$E_1 = -6.26$$

$$E_2 = -0.14$$

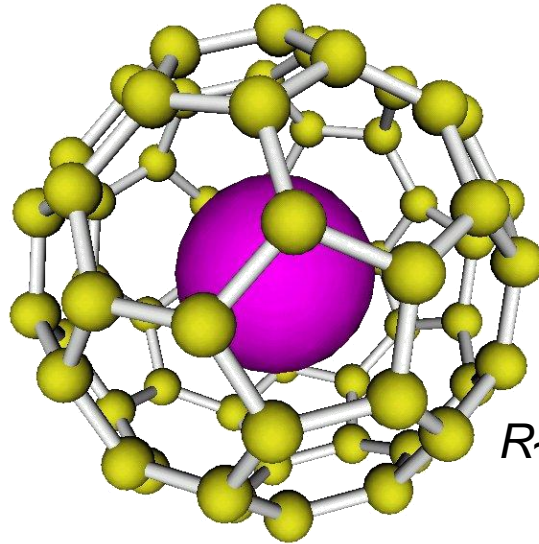


$l=3$

$$E_1 = -4.92$$



Квантовые погремушки – Эндоэдральные соединения



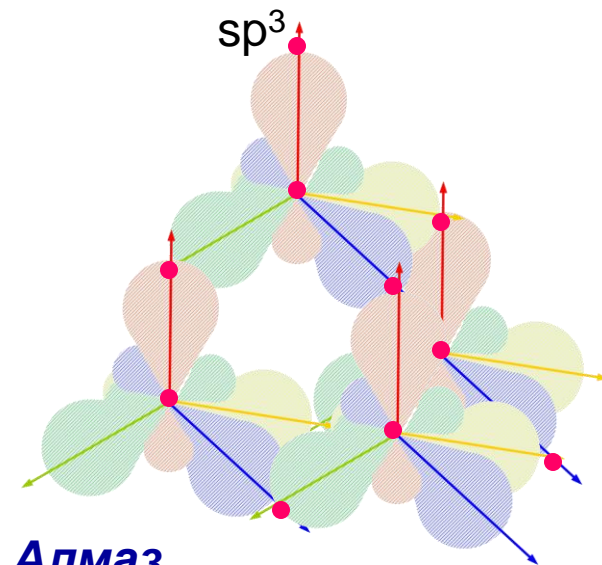
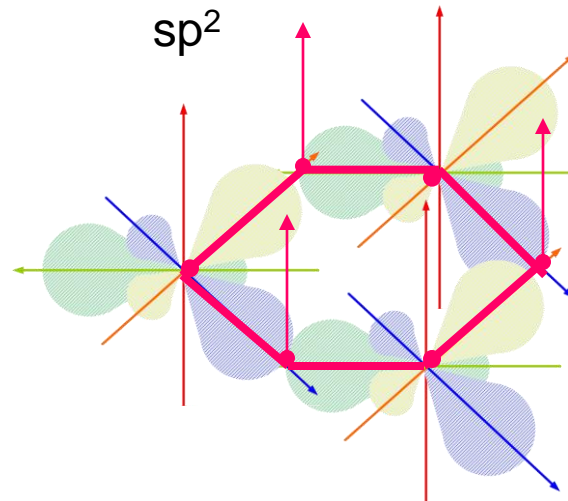
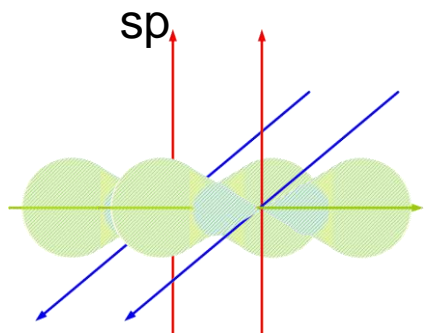
$R \sim 0.4$ нм

- ❖ Медицина
- ❖ Микроэлектроника
- ❖ Производство материалов

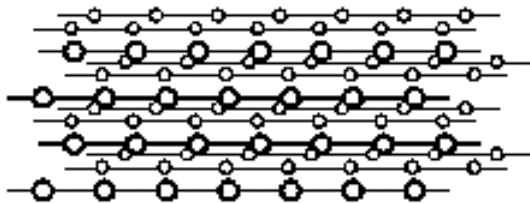
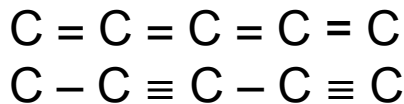
- ✓ Самые высокотемпературные сверхпроводники ($T \sim 100\text{K}$)
- ✓ Полупроводники с регулируемой зоной запрета
- ✓ Химическая изоляция инкапсулированного элемента

Аллотропные состояния углерода

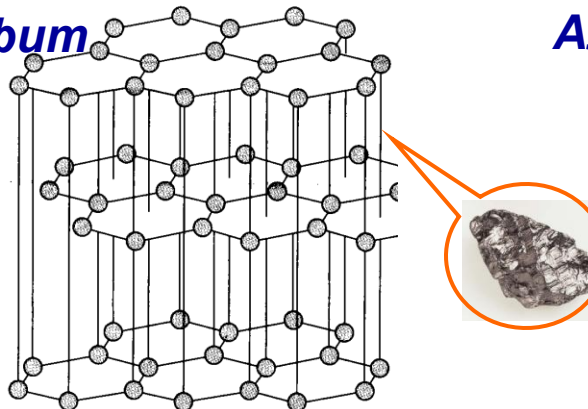
Разным гибридизациям соответствуют разные формы - аллотропы



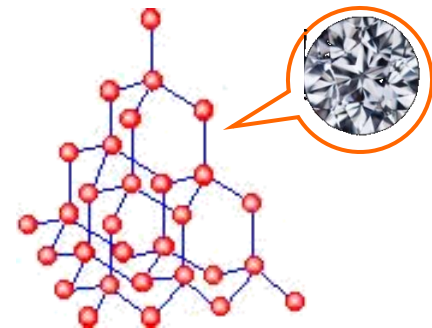
Карбин



Графит



Алмаз



Открытие фуллеренов Нобелевская премия 1996 г.

H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl, R.E. Smalley
C₆₀: Buckminsterfullerene// Letter to Nature 318, 162 (1985)

Фуллерены были получены при испарения графита в дуговом разряде в отсутствии кислорода при $T \sim 1000^\circ$.

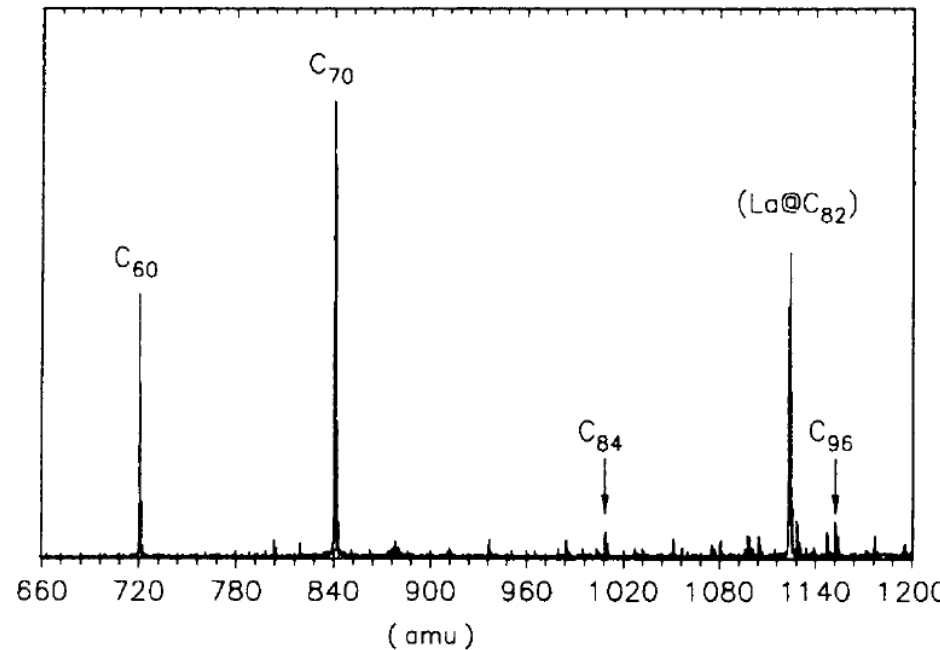
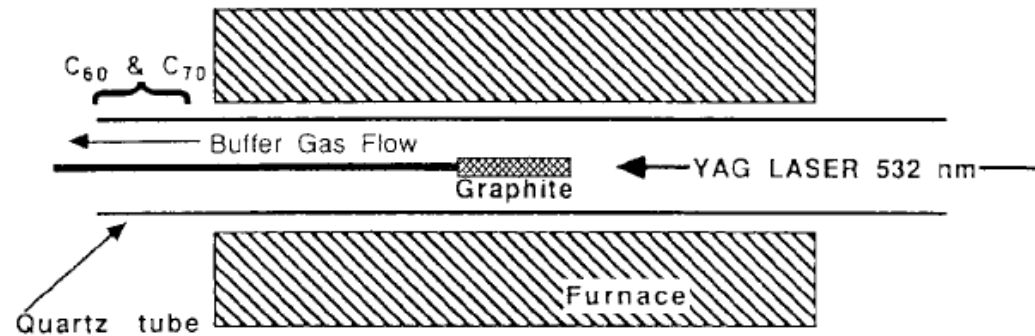
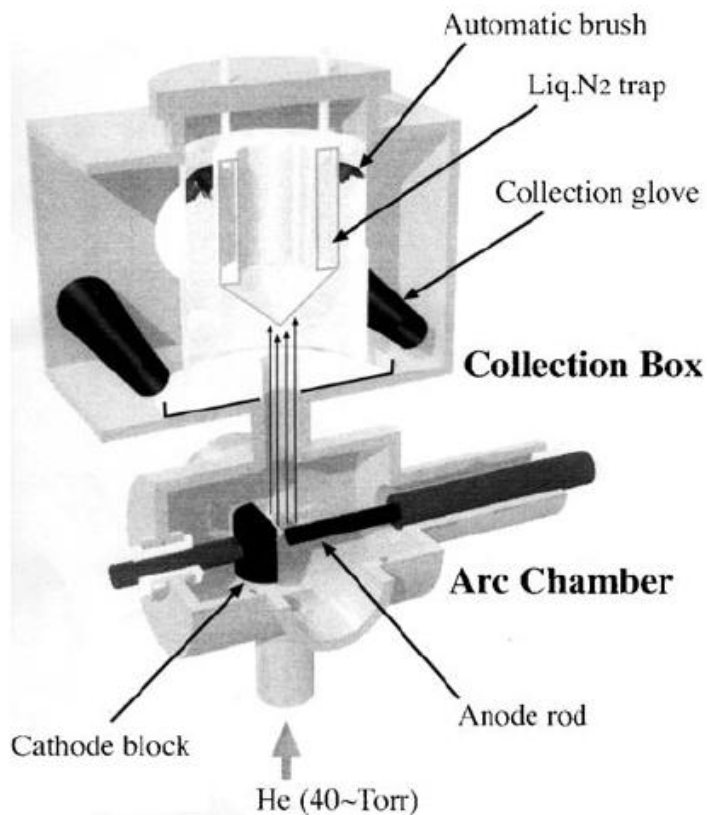


Fig. 1 A football (in the United States, a soccerball) on Texas grass. The C₆₀ molecule featured in this letter is suggested to have the truncated icosahedral structure formed by replacing each vertex on the seams of such a ball by a carbon atom.



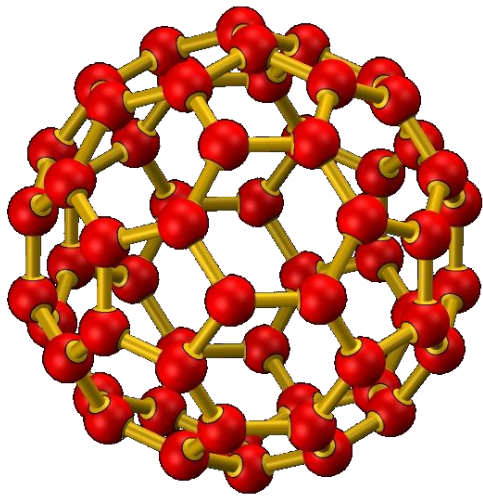
W. Kraetschmer, K. Fostiropoulos,
D. Lamb, D. R. Huffman
**Solid C₆₀ a new form of
carbone**// Nature, 347, 354 (1990)

Производство фуллеренов

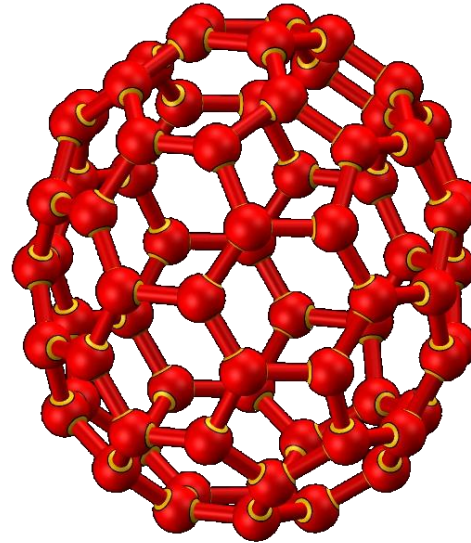


- ✓ Испарение углерода в дуговом разряде или в поле лазера
- ✓ Критическая температура $T \sim 800^\circ$
- ✓ Конвекция
- ✓ Получается смесь разных фуллеренов

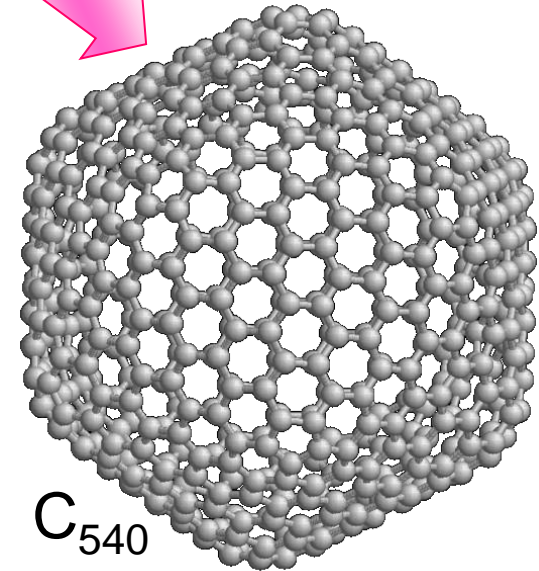
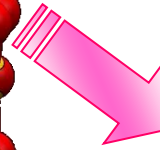
Формы фуллеренов



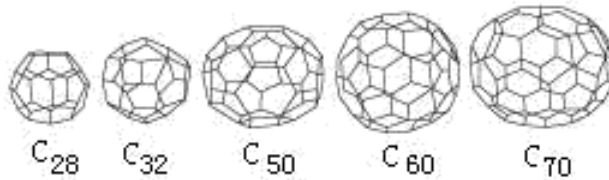
C_{60}



C_{70}



C_{540}



C_{28}

C_{32}

C_{50}

C_{60}

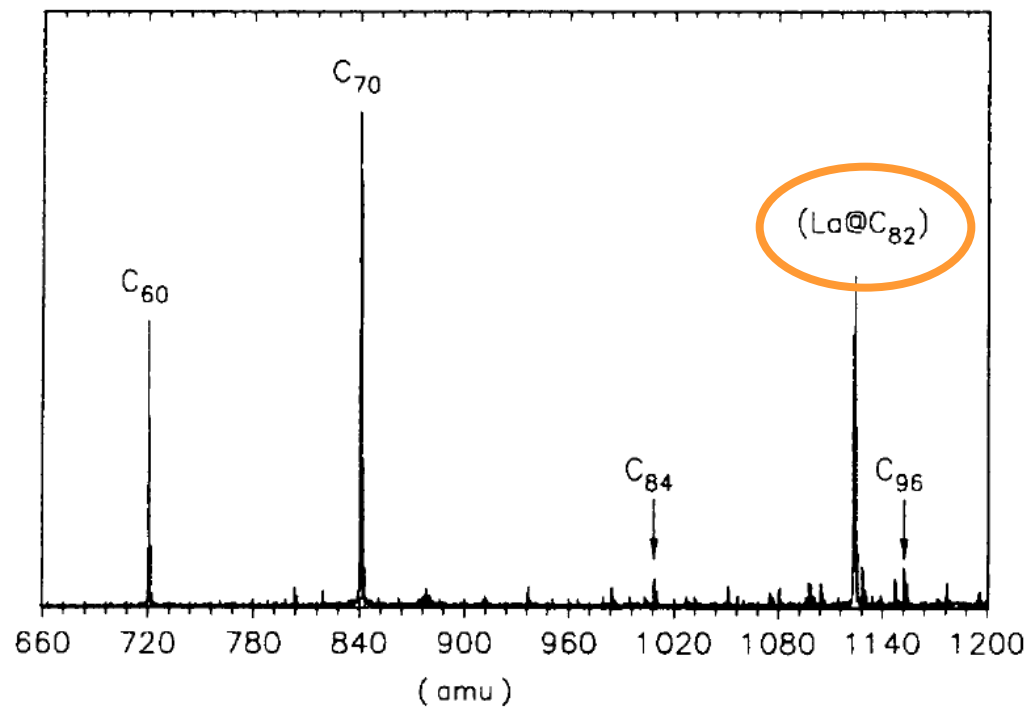
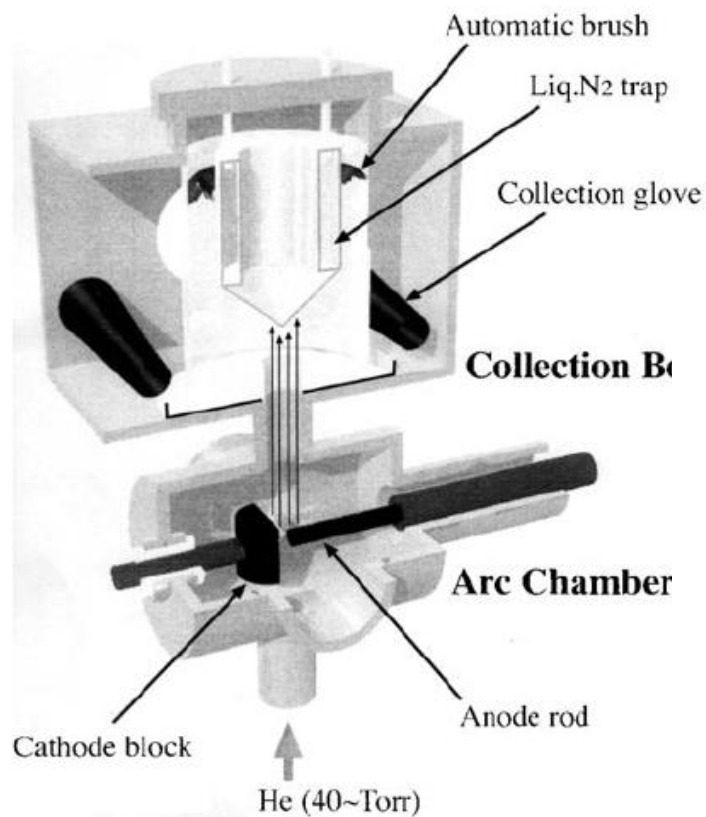
C_{70}

✓ Формула Эйлера $n_5 + 0n_6 + \dots = 12$

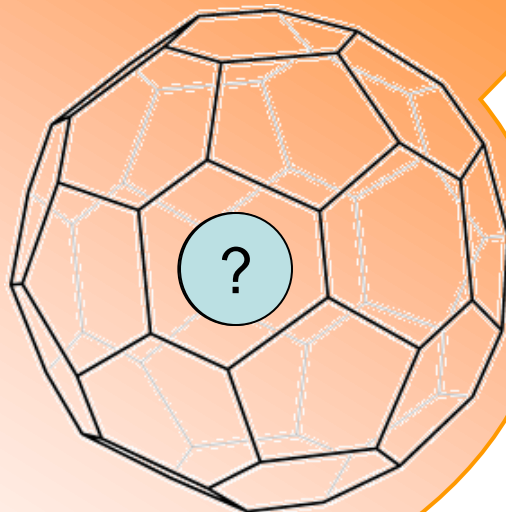
✓ C_{60} , C_{70} , C_{82} , C_{84} , C_{240} , C_{540}

✓ Правило изолированных пятиугольников

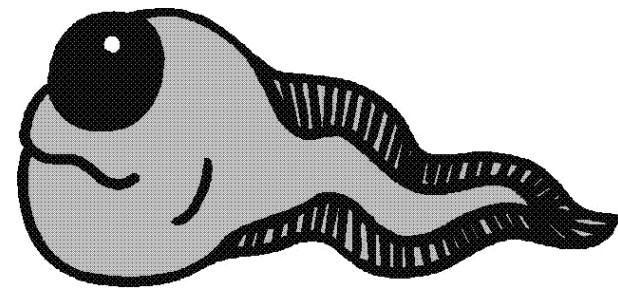
Допированные фуллерены



Эндоэдральные или экзоэдральные соединения?

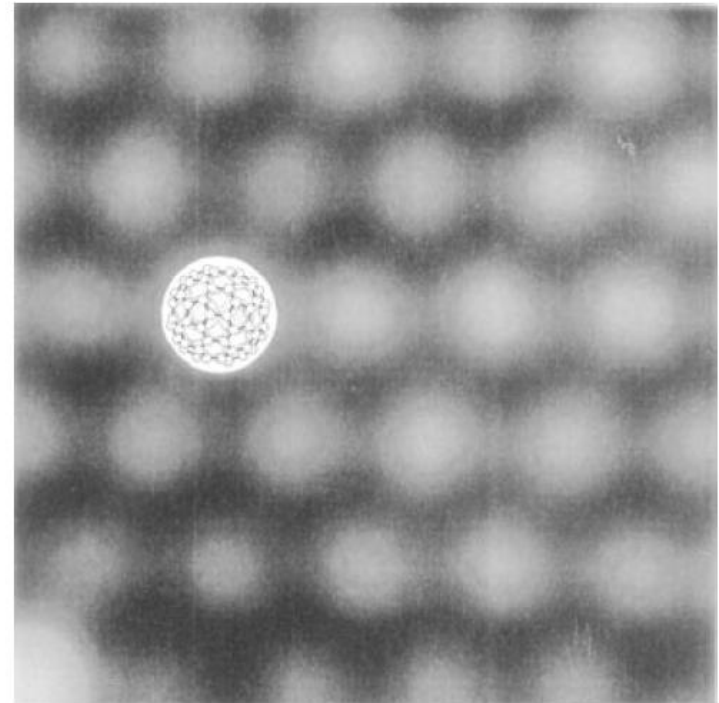


Квантовая погремушка или
квантовый головастик



Способы определения эндодральности фуллерена

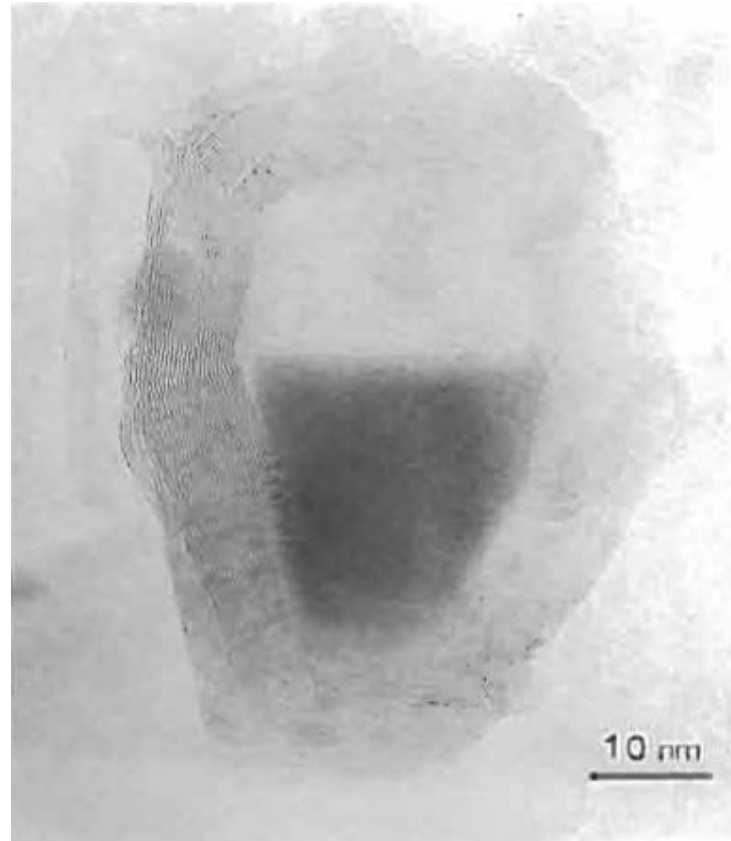
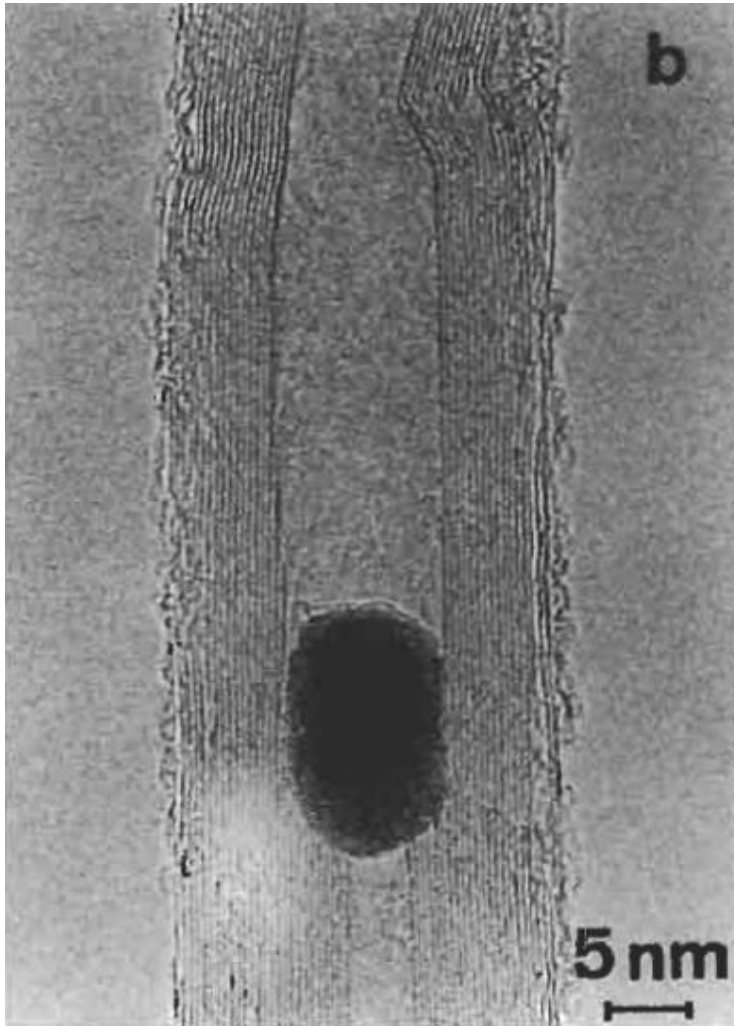
- ❖ Фрагментация, лазерная и столкновительная
- ❖ Сканирование туннельным микроскопом фуллеренов, осевших на кремниевой или медной поверхности (UHV-STM - Ultra high vacuum scanning tunneling microscope)
- ❖ Эксперименты по дифракции рентгеновских лучей, с последующей процедурой восстановления структуры
- ❖ Исследование спектров электронного парамагнитного резонанса
- ❖ Расчеты динамики образования фуллеренов



Результат сканирования третьего слоя осевшего на кремниевой поверхности $\text{Sc}_2@C_{84}$

Shinohara H, Hayashi N, Sato H, Saito Y, Wang X D, Hashizume T and Sakurai T// *J. Phys. Chem.* **97** 13 438 (1993)

Квантовые проволоки и более сложные конструкции (I)

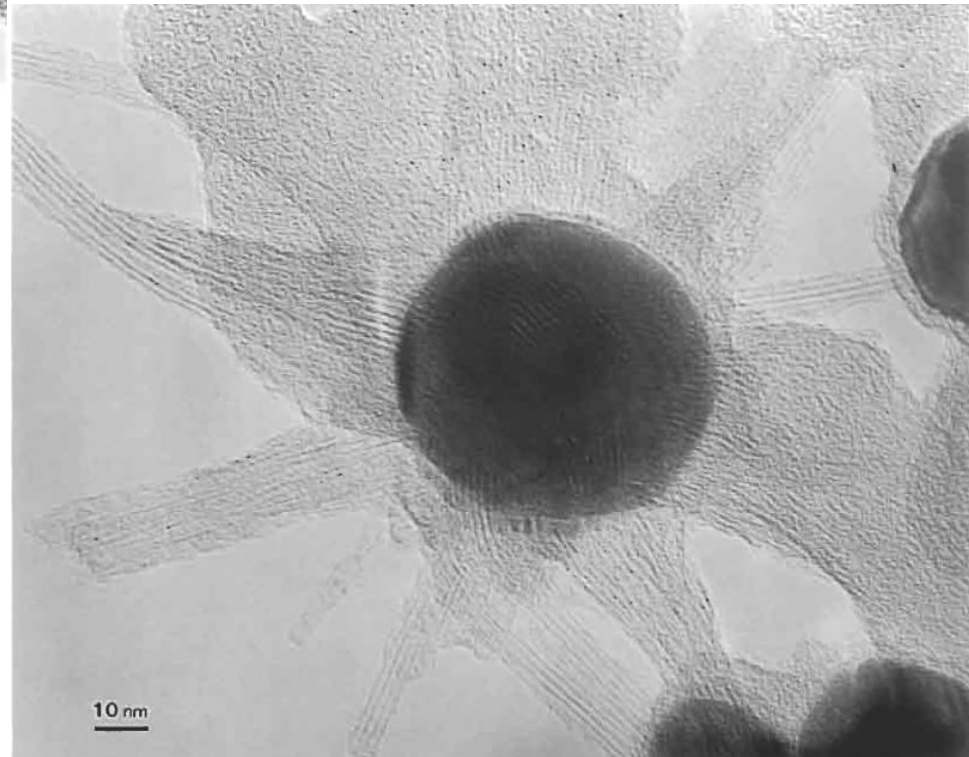
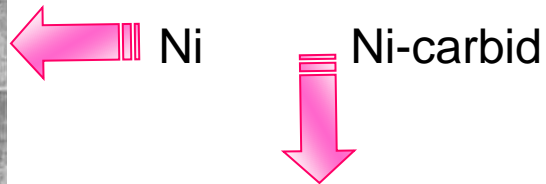
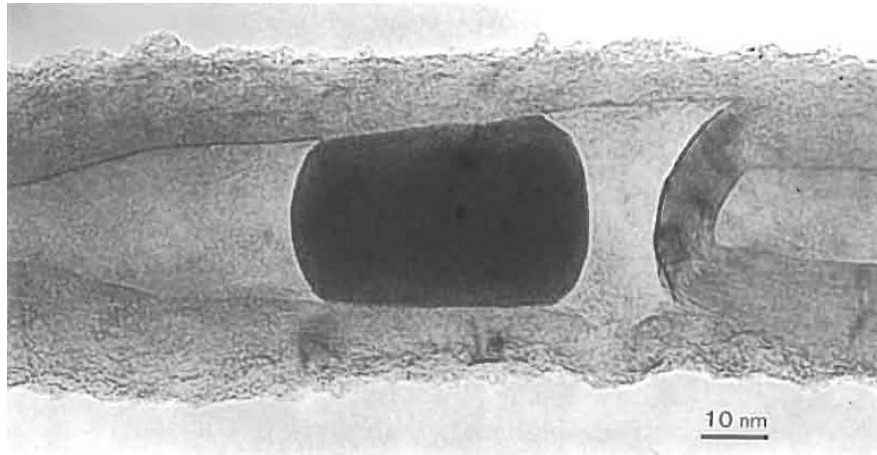


← CoSiO_2

↑ YC_2

V. Ivanov et al p.15;
Y. Saito p.153 in
Carbon nanotubes
Edited by M. Endo
PERGAMON

Квантовые проволоки и более сложные конструкции (II)



Перспективные направления

- ✓ Инкапсулирование водорода
- ✓ Инкапсулирование металлов

Y. Saito p.153 in
Carbon nanotubes
Edited by M. Endo
PERGAMON

Элементы, с которыми получены эндоэдральные соединения

I	II	IIIb	IVb	Vb	VIb	VIIb	VIIIb	Ib	IIb	III	IV	V	VI	VII	0		
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub		Uuq		Uuh		
Lanthanides *			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	
Actinides **			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	

.. [Rep. Prog. Phys. 63, 843 \(2000\).](#)

.. [Phys. Rev. B 64, 125402 \(2001\).](#)

.. [J. Phys. Chem. B 105, 5839 \(2001\).](#)

.. [Adv. Mater. Proc. Mater. Sci. Forum 282, 115 \(1998\).](#)

.. [Chem. Phys. Lett. 317, 490 \(2000\).](#)

.. [J. Chem. Phys. 117, 3484 \(2002\).](#)

.. [J. Chem. Phys. 112, 2834 \(2000\).](#)

.. [Chem. Commun. \(2004\) 1206.](#)

.. [Phys. Rev. B. 72, 153411 \(2005\).](#)

.. [Chem. Mater. 9 1773 \(1997\).](#)

.. M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P.C. Eklund, "Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes, Academic Press, San Diego, 1996, pp. 132-133.

.. [J. Am. Chem. Soc 123 181-182 \(2001\).](#)

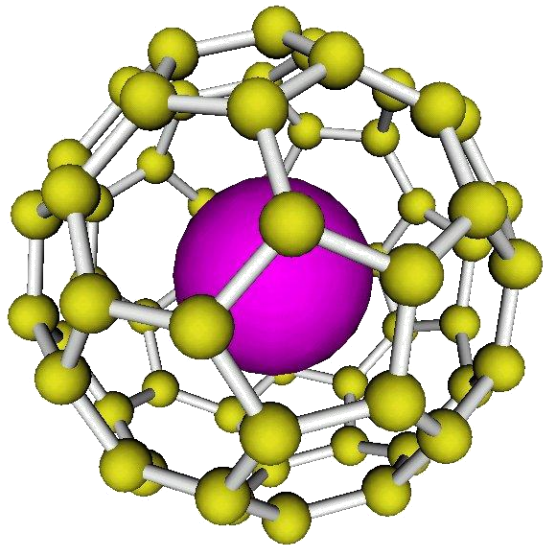
.. [Nucl. Instruments and Methods in Physic Research B 243 277-281 \(2006\).](#)

.. [J. Radioanal. Nuclear Chem. 255\(1\) 155-158 \(2003\)](#)

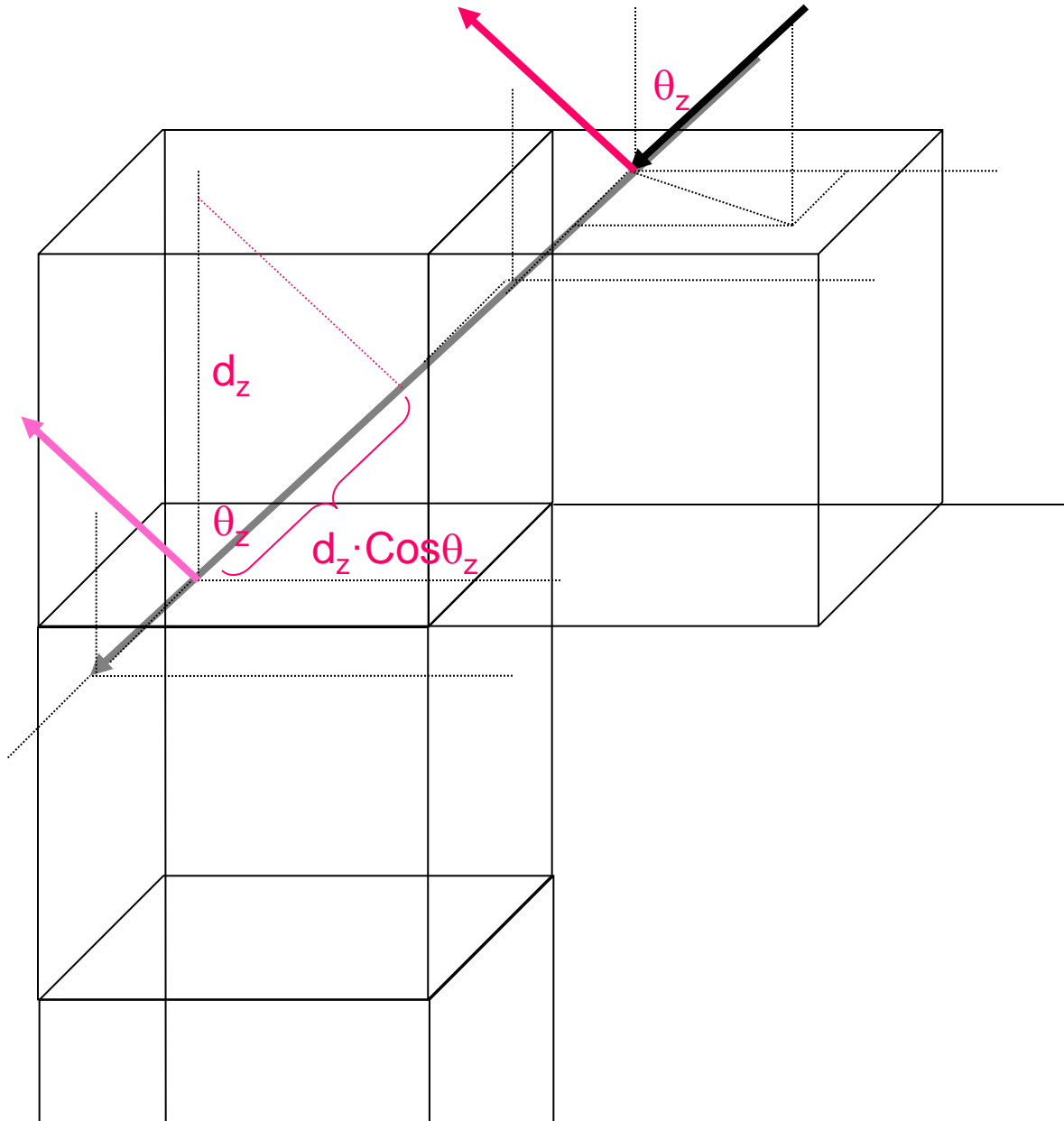
.. [J. Phys. Chem. A 104 3940-3942 \(2000\)](#)

.. [J. Am. Chem. Soc. 129 5131-5138 \(2007\)](#)

ДИФРАЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

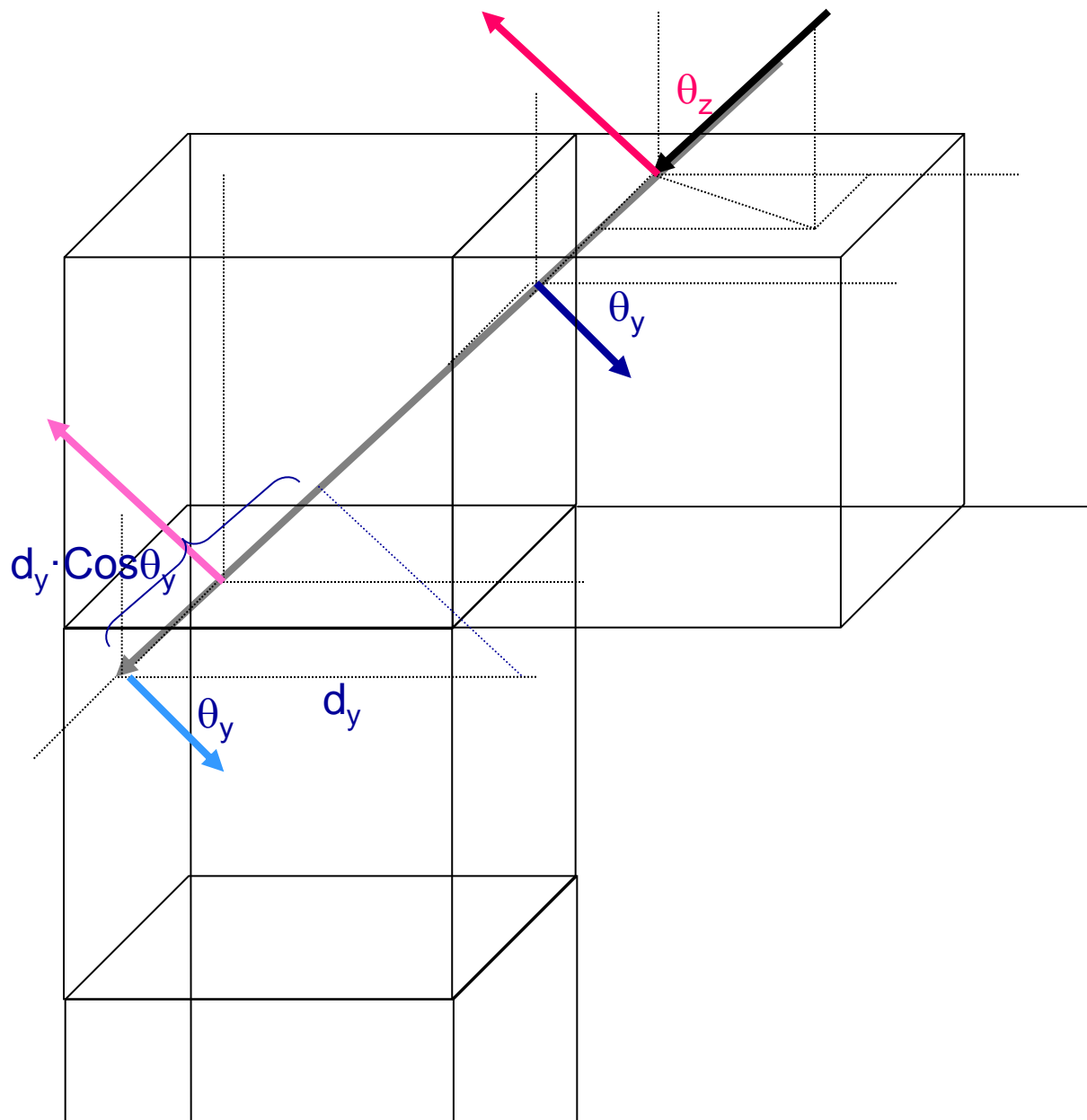


Дифракция рентгеновских лучей



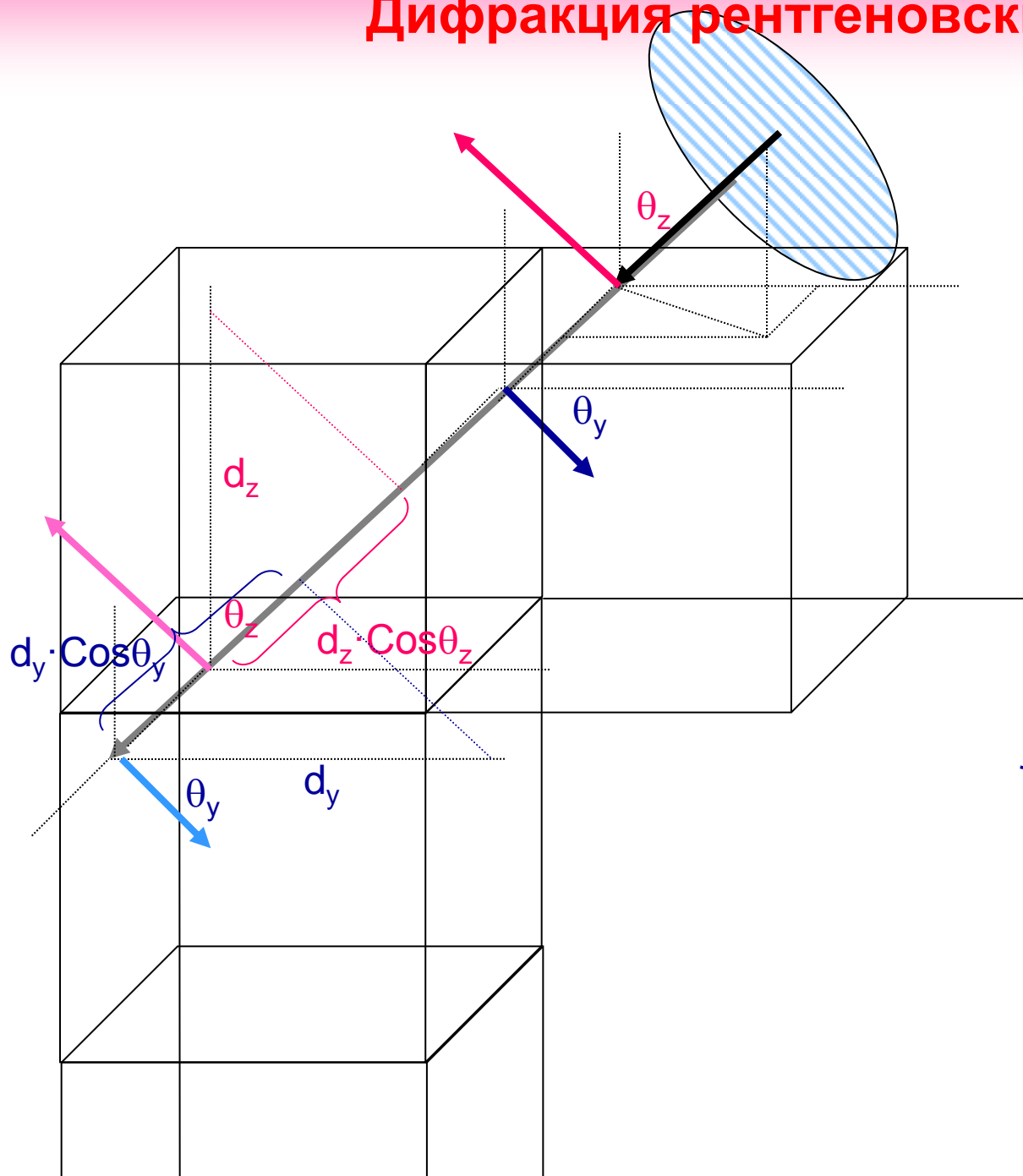
$$2 d_z \cos \theta_z = n \lambda ;$$

Дифракция рентгеновских лучей



$$2 d_y \cos \theta_y = m \lambda ;$$

Дифракция рентгеновских лучей



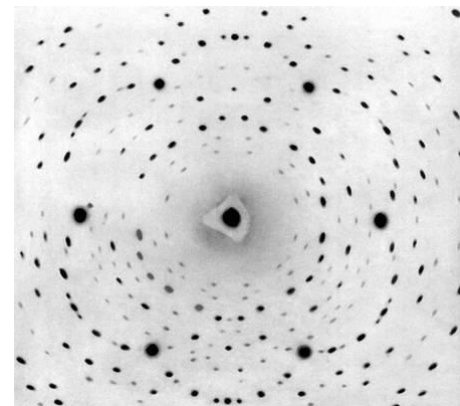
Уравнения Лауэ

$$2 d_z \cos \theta_z = n \lambda ;$$

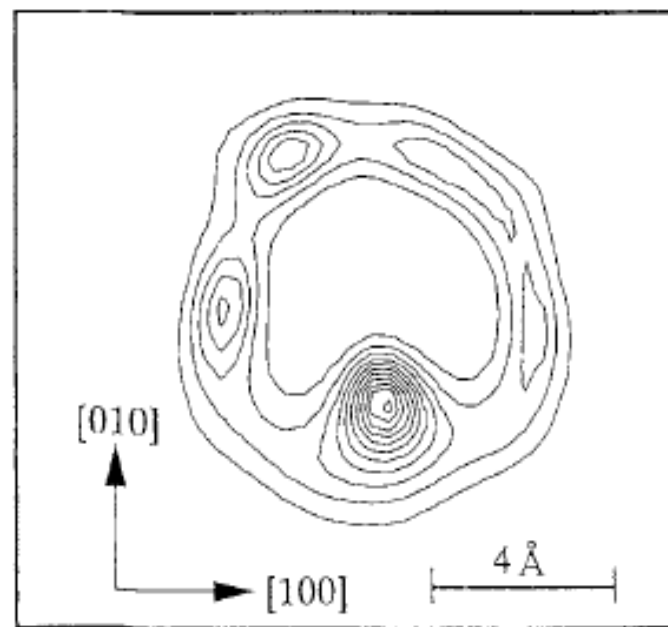
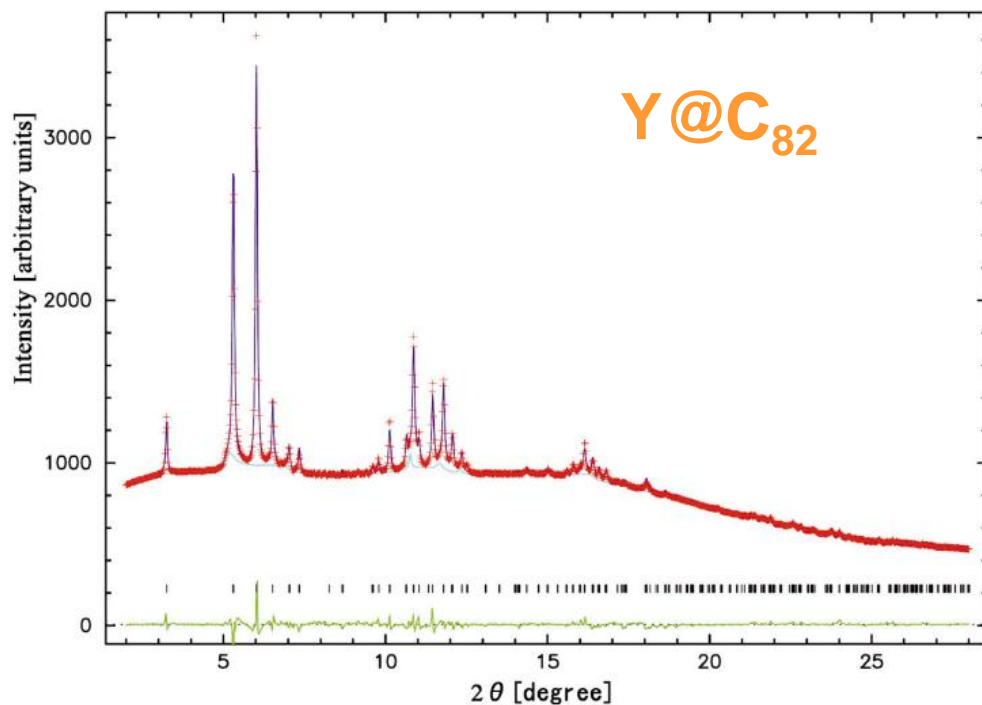
$$2 d_y \cos \theta_y = m \lambda ;$$

$$2 d_x \cos \theta_x = k \lambda ;$$

Лауэграмма берилла

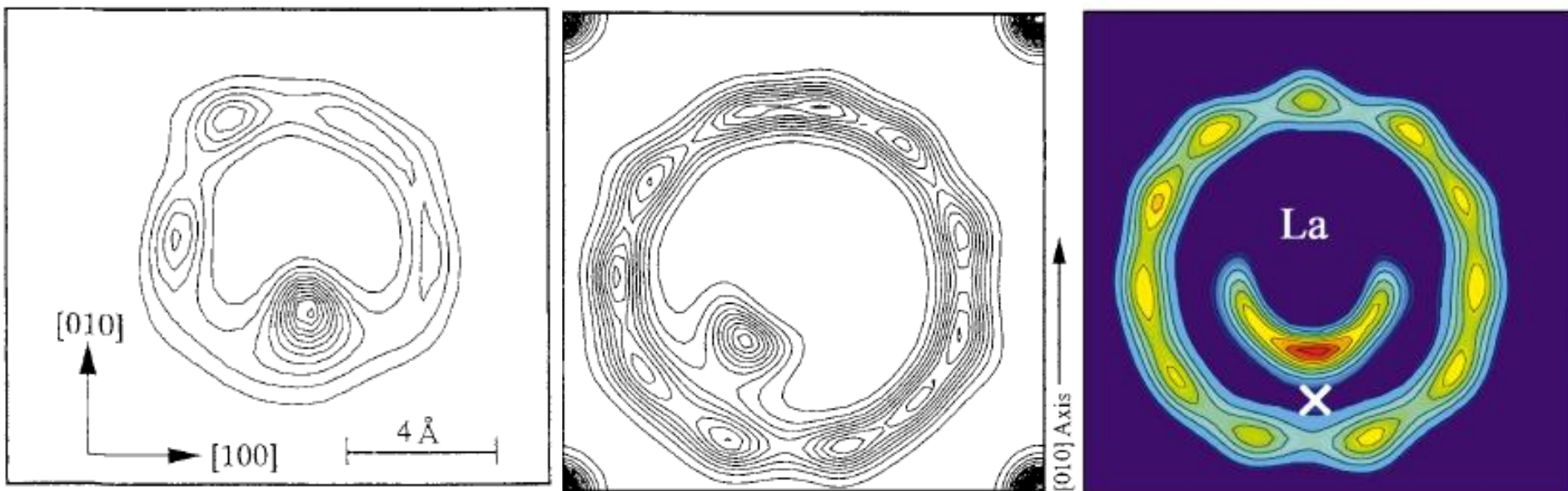


Определение структуры эндодральных соединения (I)



Метод Рейтвелда (Reitveld's method x-ray diffraction) дифракции рентгеновских лучей и восстановление плотности электронного облака методом минимальной энтропии (ENIGMA and MEED).

Определение структуры эндодраальных соединения (II)



✓ Y@C₈₂, Sc@C₈₂ имеют сходную структуру, и атом металла остается неподвижным.

✓ La@C₈₂ металл не прилипает к поверхности и совершает движение вдоль ближайшего шестиугольника

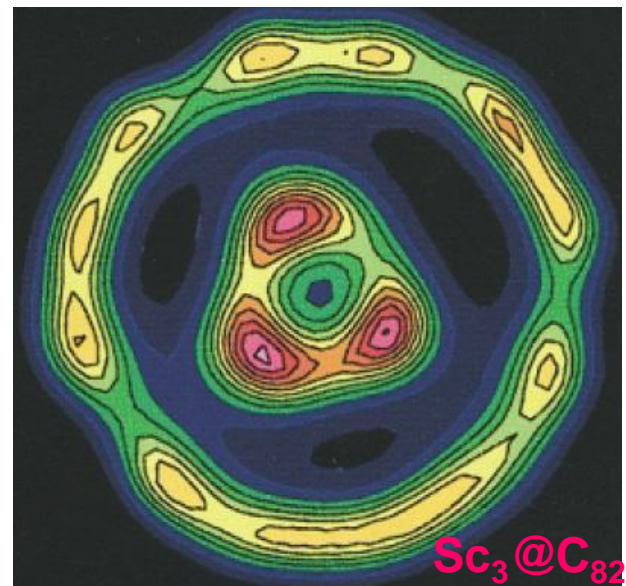
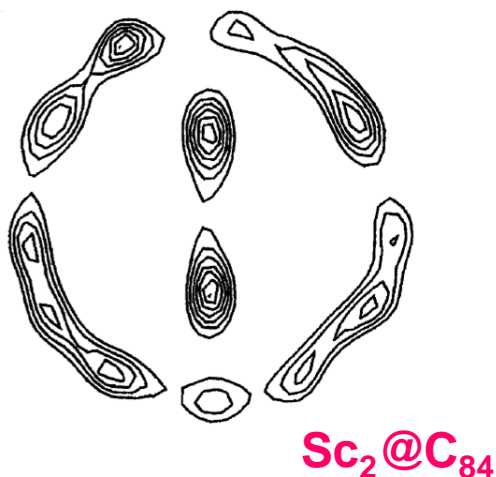
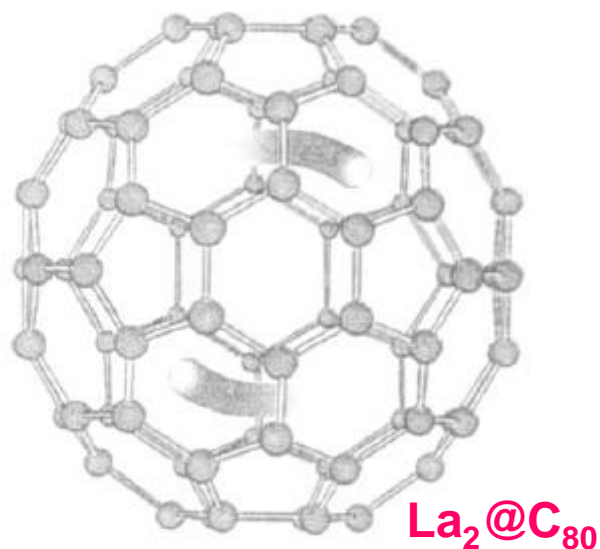
Chem. Phys. Lett. **298**, 79 (1998)

J. Phys. Chem. **95**, 7564 (1991)

Информация о:

- ✓ передаче электронов
- ✓ вращении
- ✓ движении металла

Определение структуры эндоэдральных соединения (III)

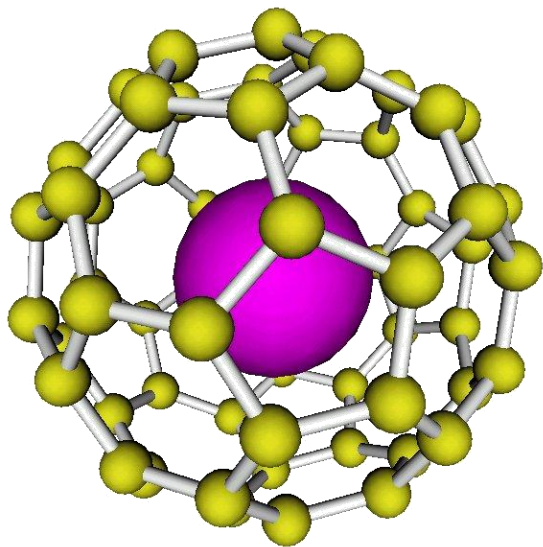


La₂@C₈₀ очень устойчивая структура с конфигурацией (La³⁺)₂@C₈₀⁶⁻
Получены также Sc₂@C₈₄, Sc₃@C₈₂ (**первый инкапсулированный кластер**), Sc₄@C₈₂

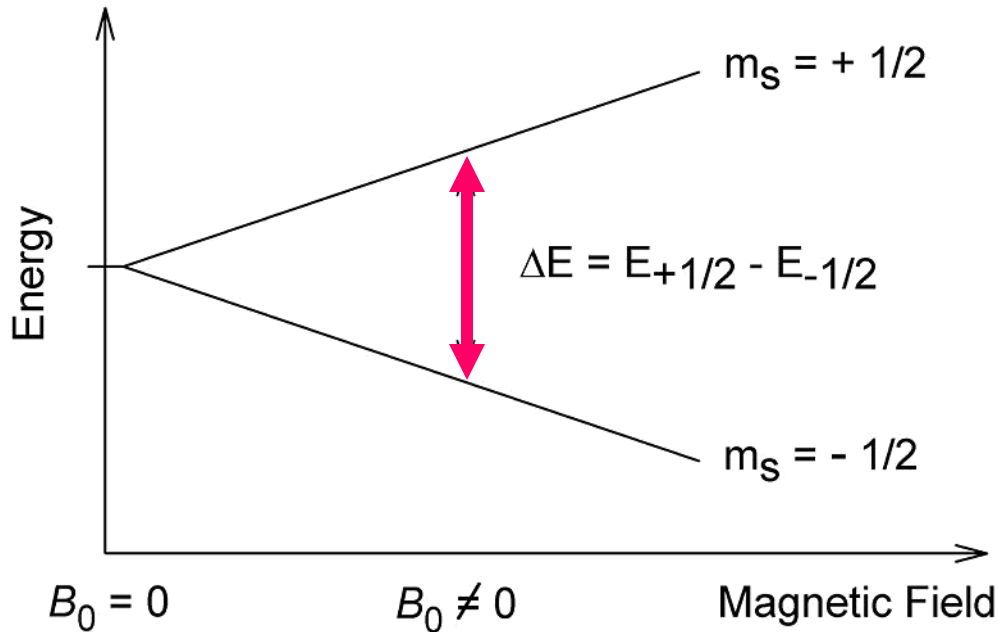
Phys. Rev. B **69**, 113412 (2004)

Phys. Rev. Lett. **83**, 2214 (1999)

ЭЛЕКТРОННЫЙ ПАРАМАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС



Электронный парамагнитный резонанс



$$\omega = g_e \mu_B B$$

ω - частота

g_e - фактор Ланде

μ_B - магнетон Бора

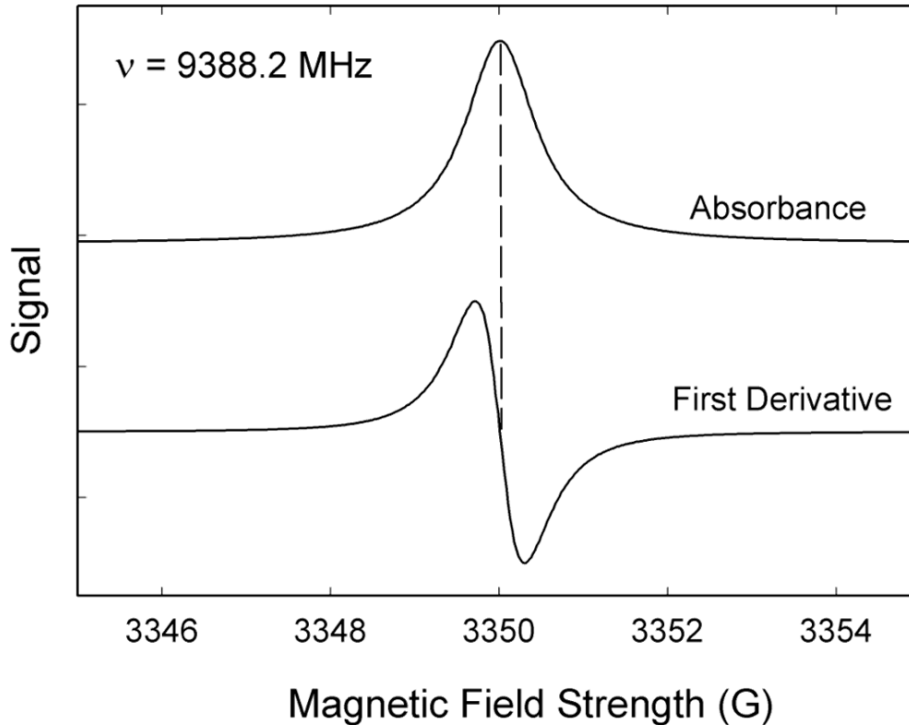
B - магнитное поле

Уравнение Дирака $\rightarrow g_e = 2$

Квантовая электродинамика $\rightarrow g_e = 2.002\ 319$

EPR, ESR

ЭПР спектр



$$\omega = g_e \mu_B B$$

ω - частота

g_e - фактор Ланде

μ_B - магнетон Бора

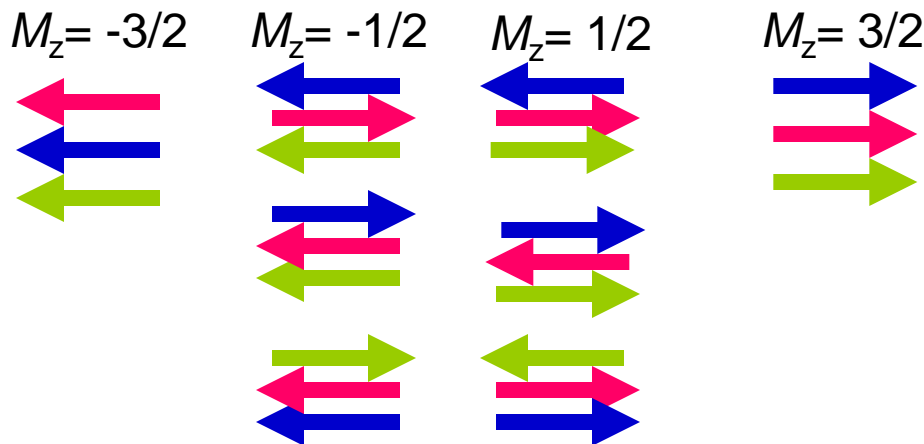
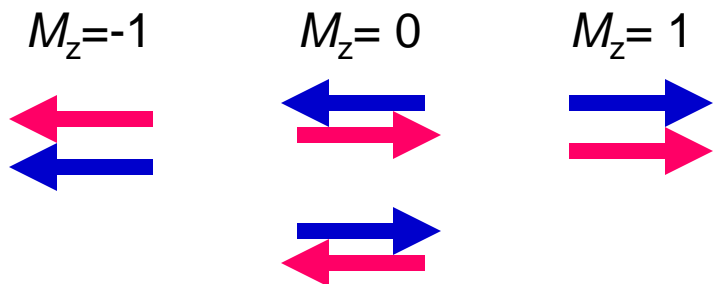
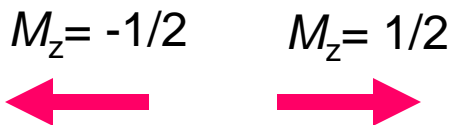
B - магнитное поле

- ✓ Можно менять частоту или величину магнитного поля
- ✓ Можно приводить спектр поглощения или первую производную

Сверхтонкая структура в ЭПР спектрах молекул

- ✓ Наличие спина I у одного ядра в атомах молекулы приводит к расщеплению ЭПР спектра на $2I+1$ компонент
- ✓ Наличие спина I у M эквивалентных ядер приводит к максимальному возможному спину $MI \rightarrow$ число компонент $2MI+1$
- ✓ В общем случае число компонент $(2M_1I_1+1)(2M_2I_2+1)\dots$

Соотношение интенсивности компонент



для «свободных» молекул
(растворы и газы)

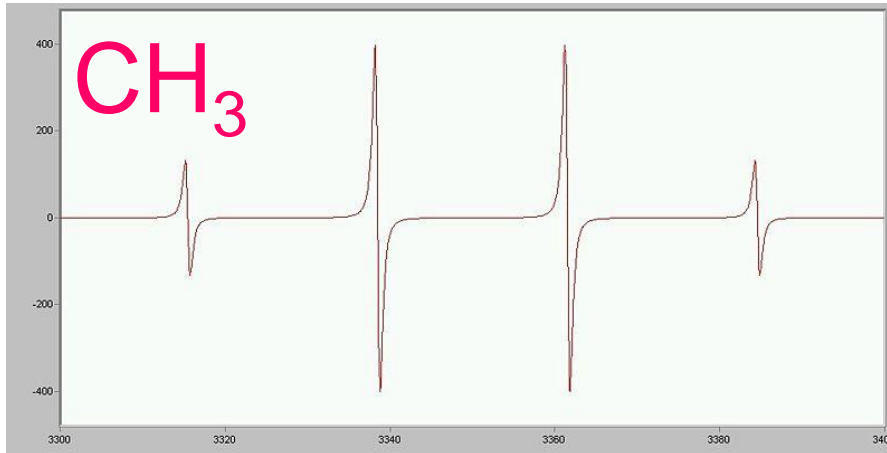
Один спин $I=1/2$: две линии,
интенсивности относятся как 1:1

Два спина $I=1/2$: три линии,
интенсивности относятся как 1:2:1

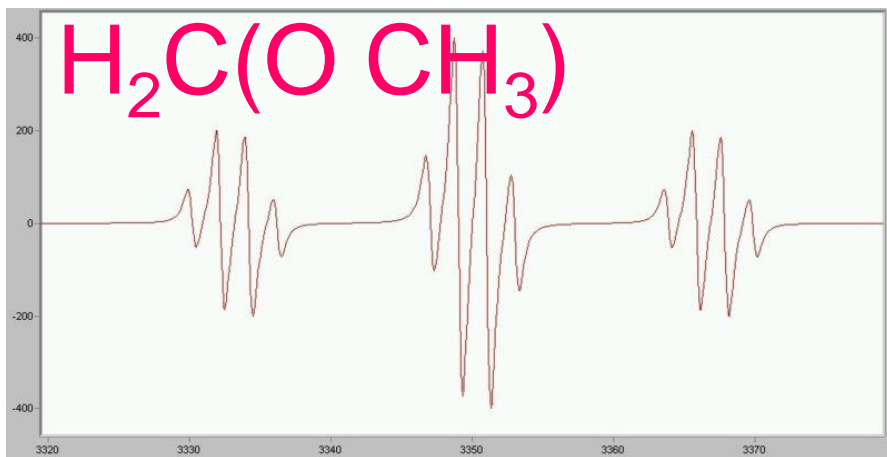
В общем случае интенсивности линий
относятся как элементы в строке
треугольника Пуассона:

1
1 1
1 2 1
1 3 3 1
1 4 6 4 1
1 5 10 10 5 1

Сверхтонкая структура в ЭПР спектрах молекул (примеры)



✓ 3 эквивалентных ядра водорода
→ 4 линии с 1:3:3:1



✓ 2 и 3 эквивалентных ядра
водорода → $3 \cdot 4 = 12$ линий. Внутри
триплета интенсивности
соотносятся как 1:2:1, внутри
квартета 1:3:3:1
Наблюдается триплет квартетов,
но при других параметрах
молекулы могло бы быть и
наоборот

Эндоэдральные соединения для которых изучают ЭПР спектры

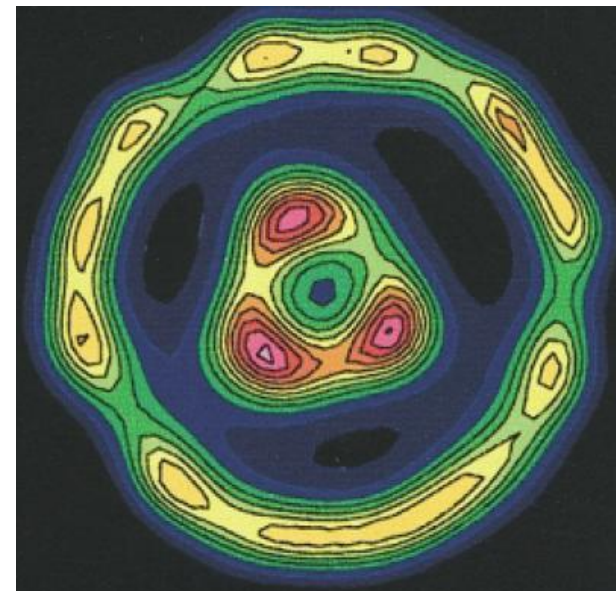
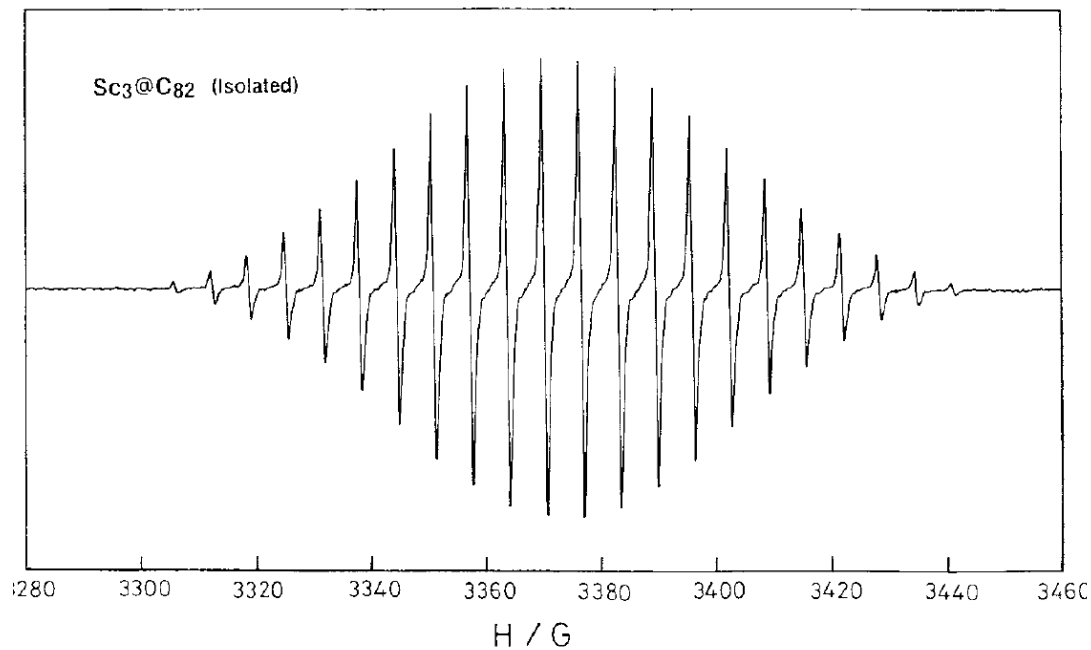
I	II	IIIb	IVb	Vb	VIb	VIIb	VIIIb	Ib	IIb	III	IV	V	VI	VII	0		
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be										B	C	N	O	F		Ne
Na	Mg										Al	Si	P	S	Cl		Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub		Uuq		Uuh		
Lanthanides *			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	
Actinides **			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	

Из всех металлофуллеренов только $M@C_{82}$ и $La_2@C_{80}$ удалось получить в растворе

Все $M_2@C_{82}$ и ряд $M@C_{82}$ не обладают ЕПР спектрами

Например $Gd@C_{82}$ показывает только тонкую структуру, в $Lu@C_{82}$ сверхтонкую структуру невозможно разрешить, а $Ho@C_{82}$ не виден в ЕПР спектре (сильная спиновая релаксация)

ЭПР спектр $\text{Sc}_3@C_{82}$



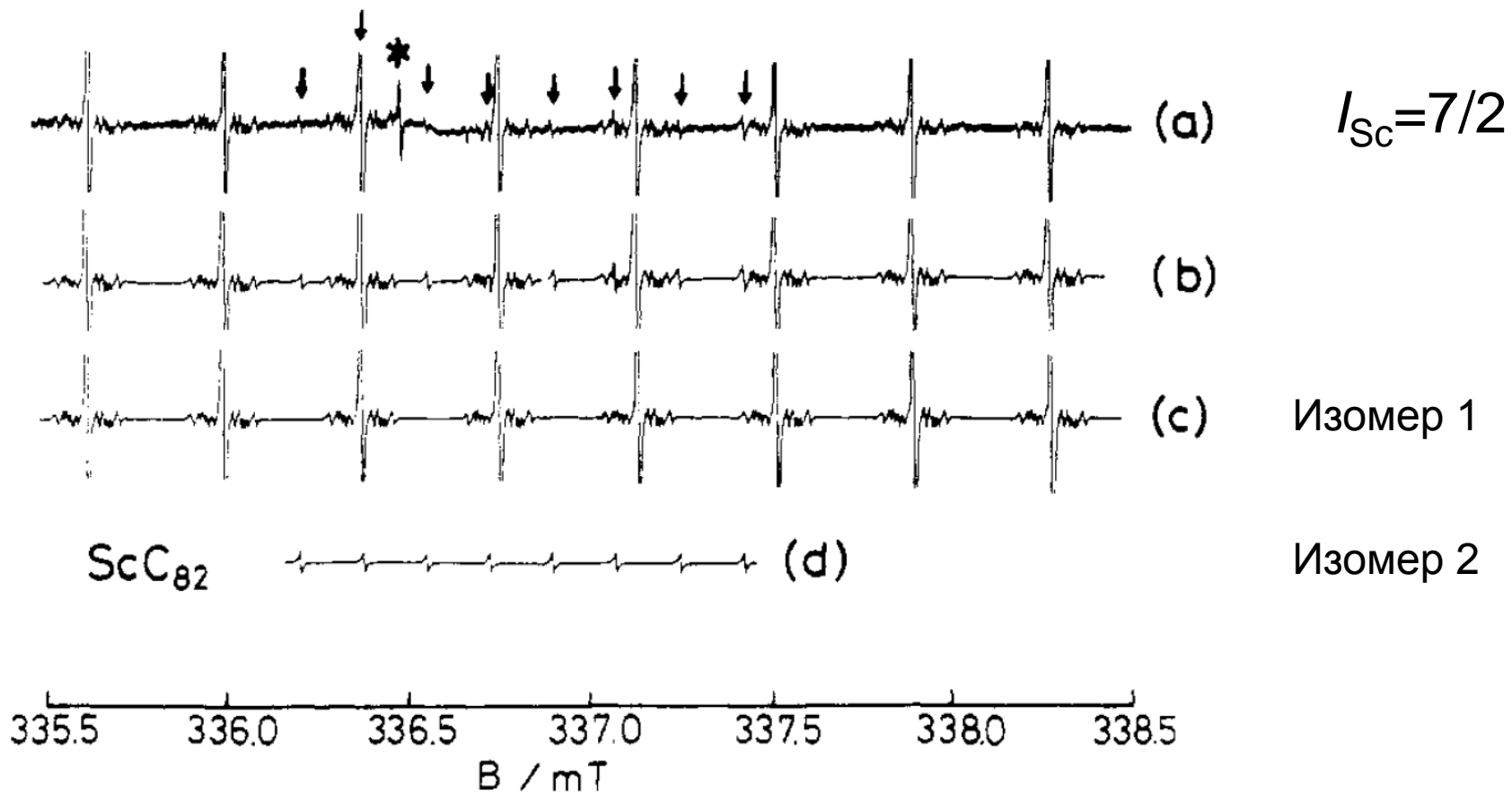
- ✓ 22 эквидистантные линии $\text{Sc}_3@C_{82}$ говорят о геометрической эквивалентности трех атомов скандия
- ✓ два изомера

J. Am. Chem. Soc. **116**, 9367; *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3415 (1994)

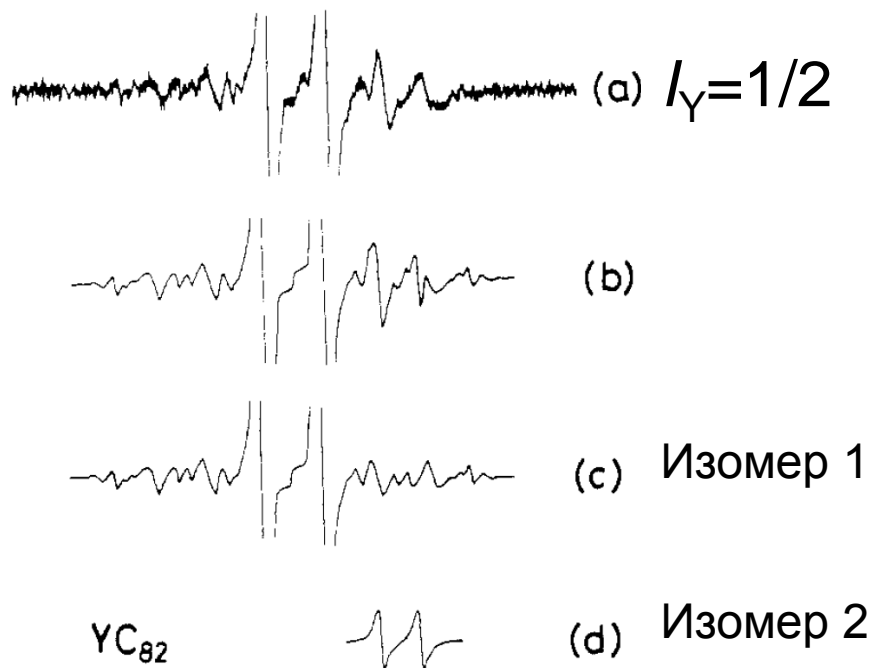
Phys. Rev. B **69**, 113412 (2004)

Phys. Rev. Lett. **83**, 2214 (1999)

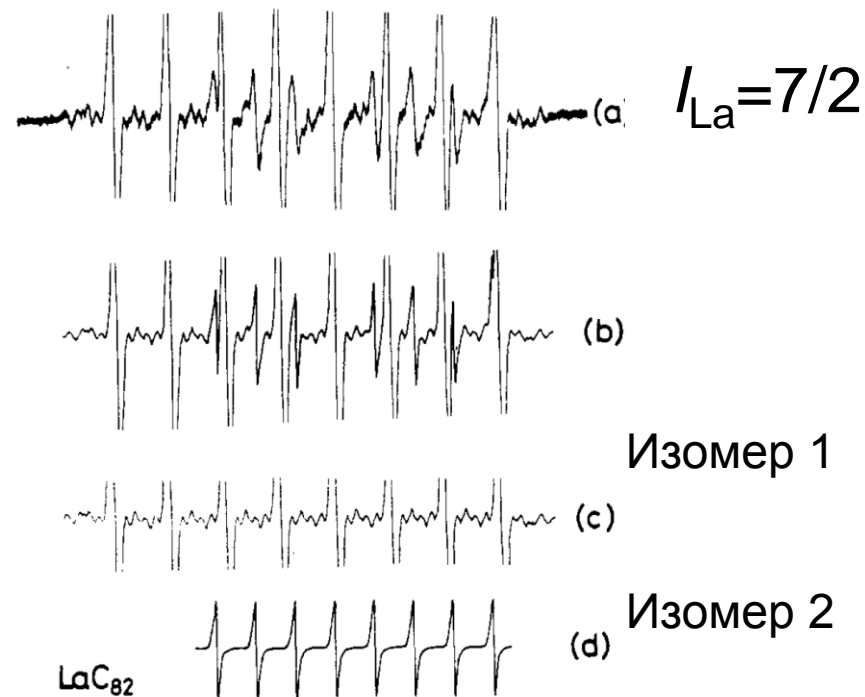
ЭПР спектр Sc@C₈₂



ЭПР спектр $Y@C_{82}$ и $La@C_{82}$



336.5 336.6 336.7 336.8 336.9 337.0
B / mT



336.1 336.3 336.5 336.7 336.9 337.1 337.3
B / mT

Результаты исследования ЭПР спектров M@C₈₂

TABLE I: Summary of g Values and Hyperfine Coupling Constants (HFCC, in mT) Due to Metals Determined from the ESR Spectra of Metal-Encapsulated Fullerenes M@C₈₂ (M = Sc, Y, La)

M@C ₈₂	g value	HFCC by M	rel ratio
Sc@C ₈₂			
isomer I	2.0002	0.3799	1.0
isomer II	2.0009	0.1744	0.07
Y@C ₈₂			
isomer I	2.0006	0.0490	1.0
isomer II	2.0001	0.0321 ^a	0.15 ^a
La@C ₈₂			
isomer I	2.0012	0.1151	1.0
isomer II	2.0006	0.0835 ^a	0.27 ^a

^aThese values are deduced based on the results of ESR simulations.

g дает информацию об величине спин-орбитального взаимодействия и его величина показывает момент оболочки на которой находится неспаренный электрон:

$$g_F = g_J \frac{F(F+1) - I(I+1) + J(J+1)}{2F(F+1)} + g_I \frac{F(F+1) + I(I+1) - J(J+1)}{2F(F+1)}$$

✓ **Отсутствие изомеров**

✓ **Определения валентного состояния допированного атома:**



J. Phys. Chem. **96**, 7159 (1992)

J. Phys. Chem. **99**, 856 (1995)

Appl. Magn. Reson. **11**, 293 (1996)