

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

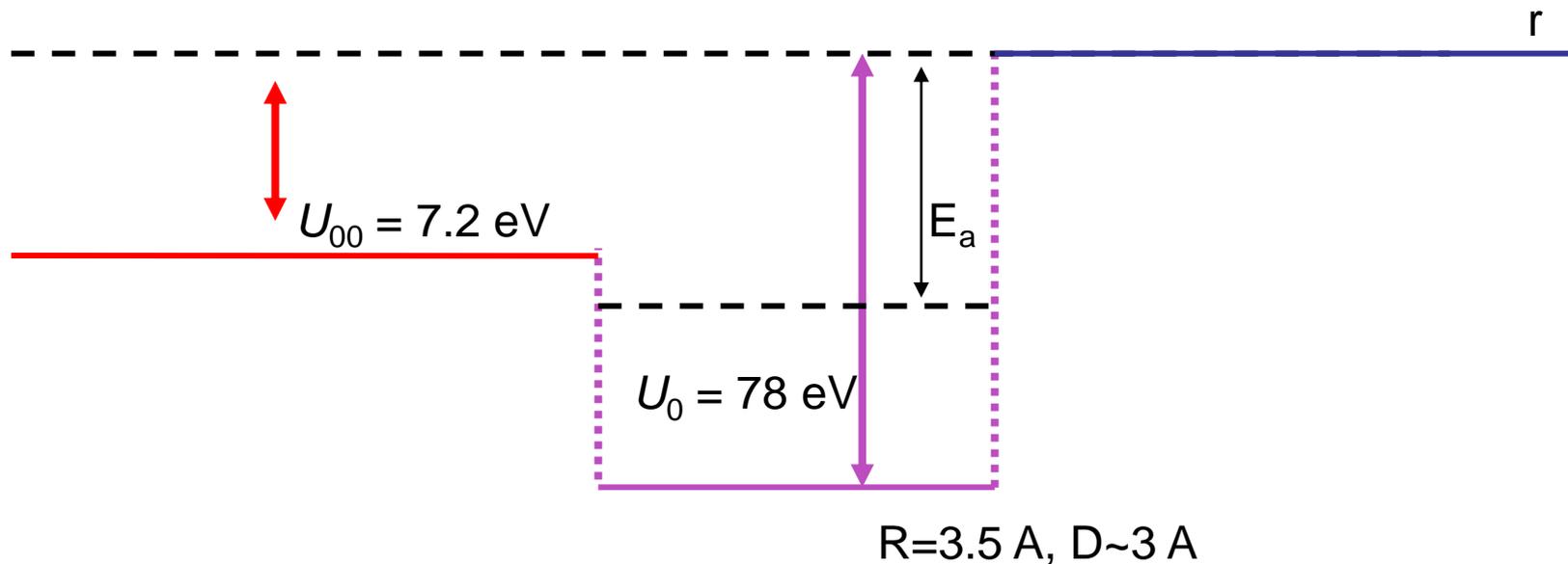
3. Сжатые атомы и резонансы формы

- а) определение потенциала фуллерена.
- б) резонансы формы в спектре фуллерена.
- в) Спектр эндоэдрального соединения.
- г) сжатые атомы.

Потенциал фуллерена

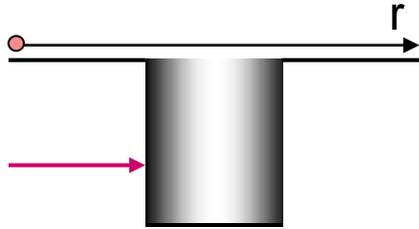
Y.B. Xu, M.Q. Tan, and U. Becker, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3538 (1996).
«Oscillations in the Photoionization Cross Section of C_{60} »

$\lambda > R$



Волновые функции трехмерной потенциальной ямы

Сферическая потенциальная яма конечной глубины



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

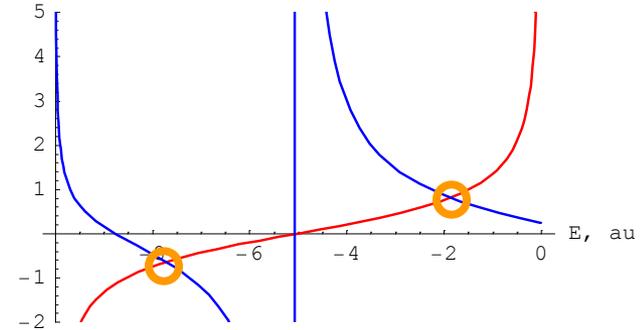
$$R_1 = 1 \text{ au}, R_2 = R_1 + 1 \text{ au}, U_0 = -10 \text{ au}$$

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

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

$$E_1 = -7.70$$

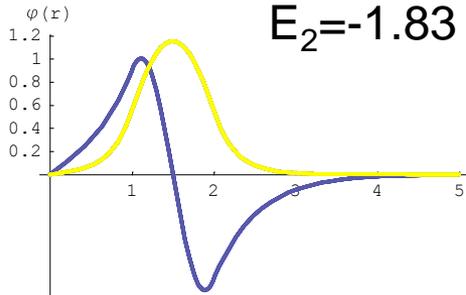
$$E_2 = -1.86$$



$l=0$

$$E_1 = -7.70$$

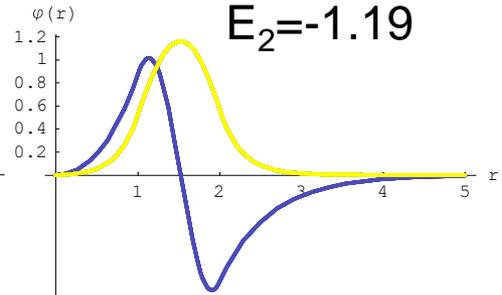
$$E_2 = -1.83$$



$l=1$

$$E_1 = -7.21$$

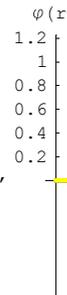
$$E_2 = -1.19$$



$l=2$

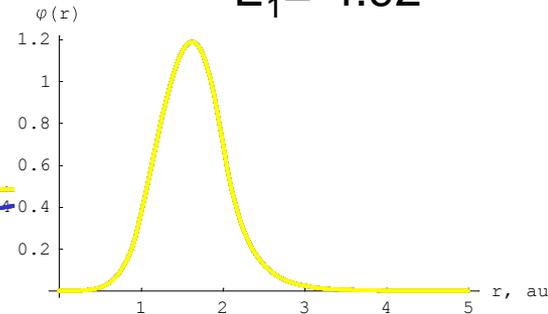
$$E_1 = -6.26$$

$$E_2 = -0.14$$



$l=3$

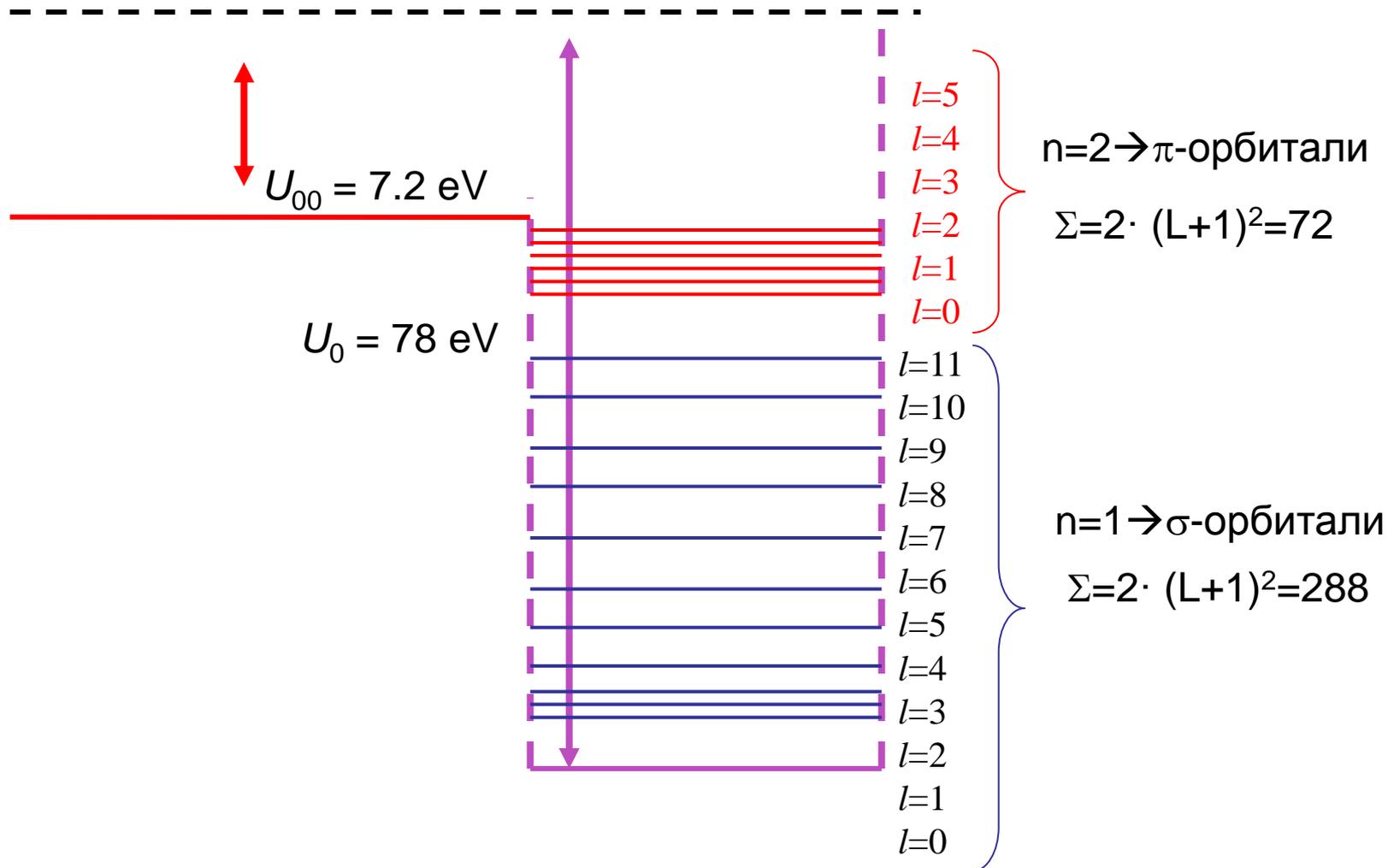
$$E_1 = -4.92$$



Спектр фуллерена в потенциальной модели

Y.B. Xu, M.Q. Tan, and U. Becker, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3538 (1996).

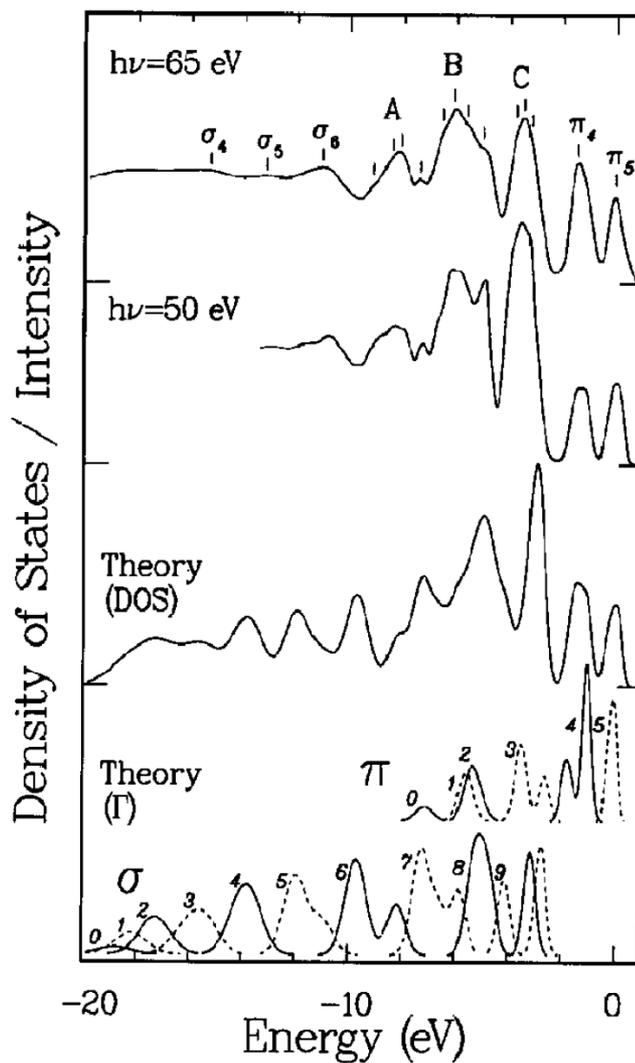
«Oscillations in the Photoionization Cross Section of C_{60} »



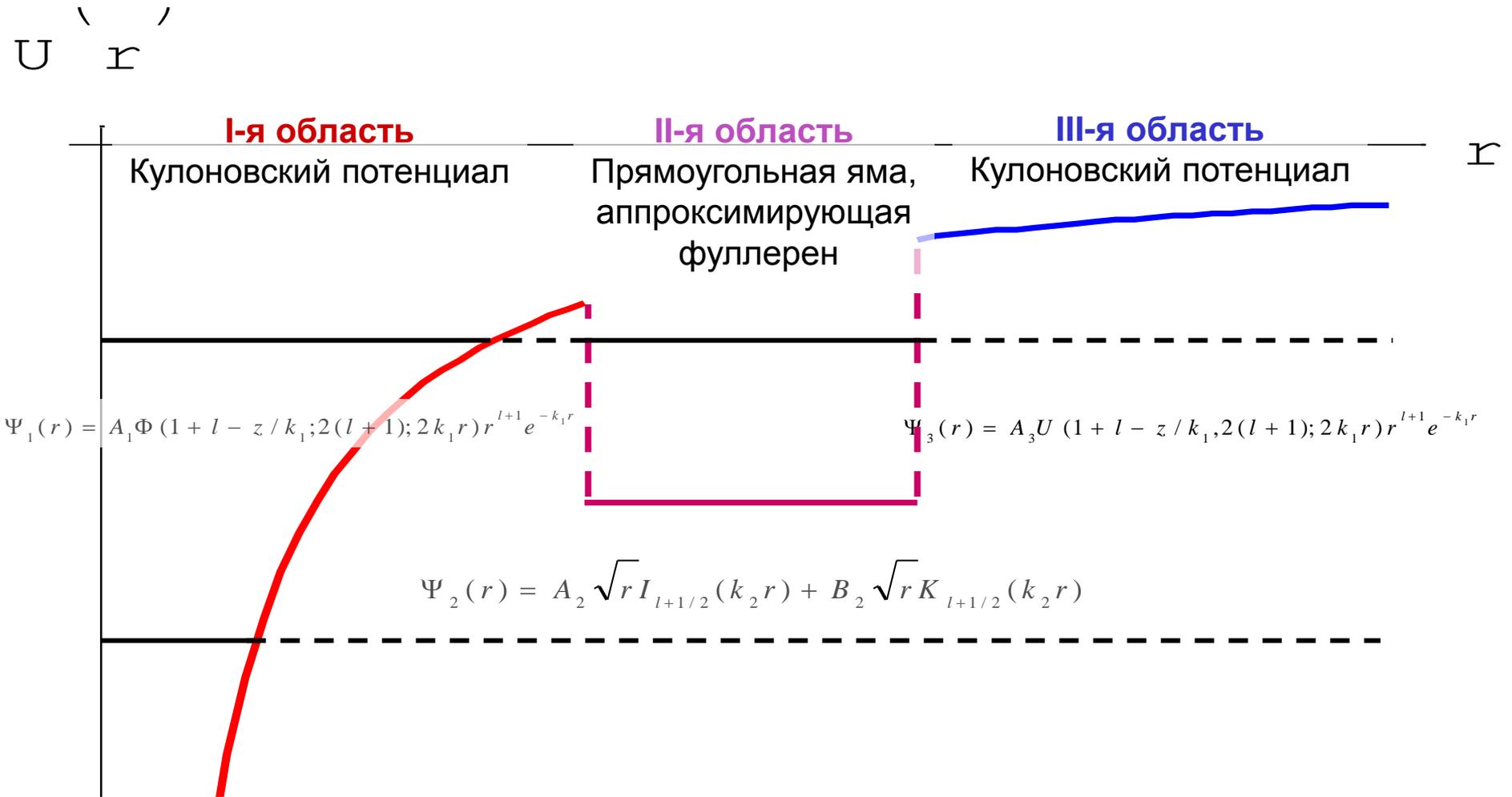
Спектр фуллерена в потенциальной модели

J. L. Martins, N. Troullier and J.H. Weaver, *Chem. Phys. Lett.* **180**, 457 (1991).

«Analysis of occupied and empty electronic states of C₆₀»



Потенциал H@C₆₀



$$\Phi = {}_1F_1, U = {}_2F_0$$

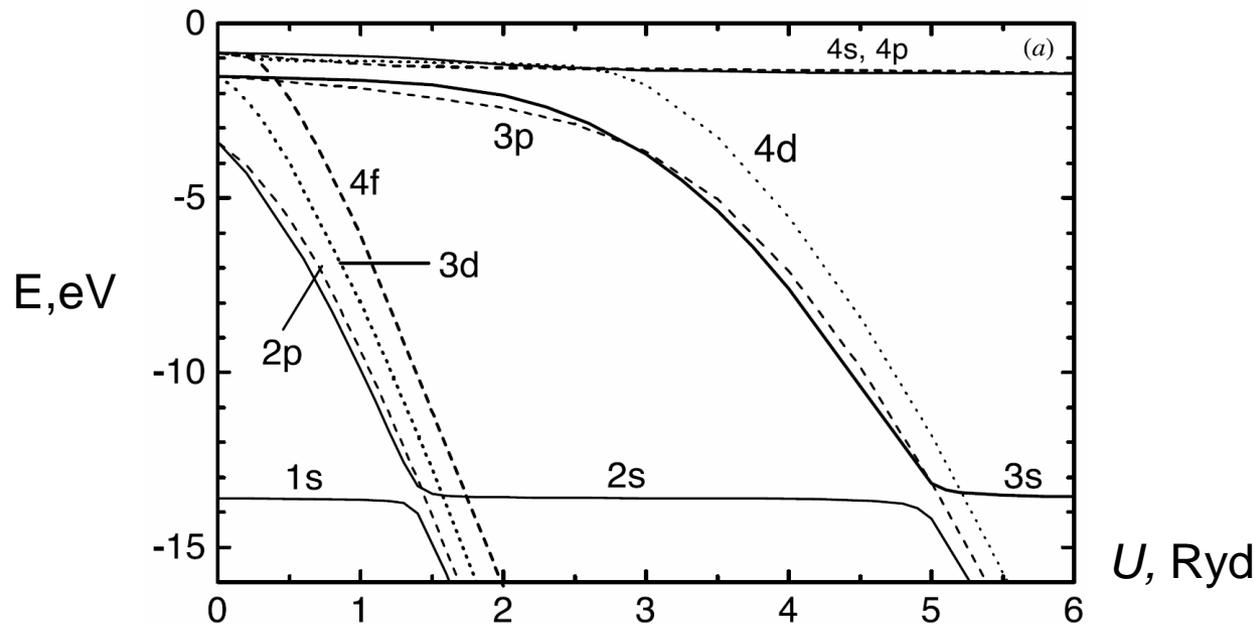
$$I_{l+1/2}, K_{l+1/2}$$

- вырожденные гипергеометрические функции

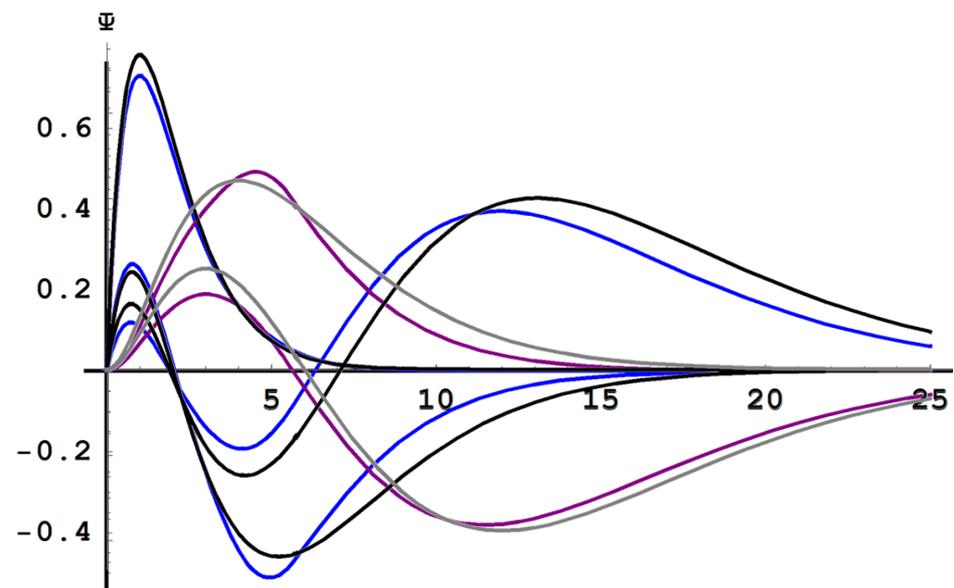
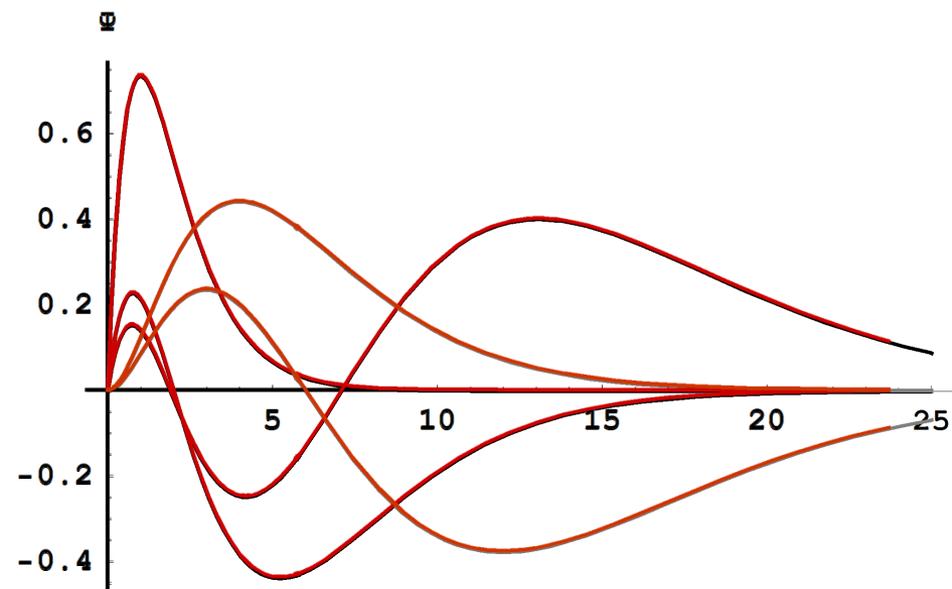
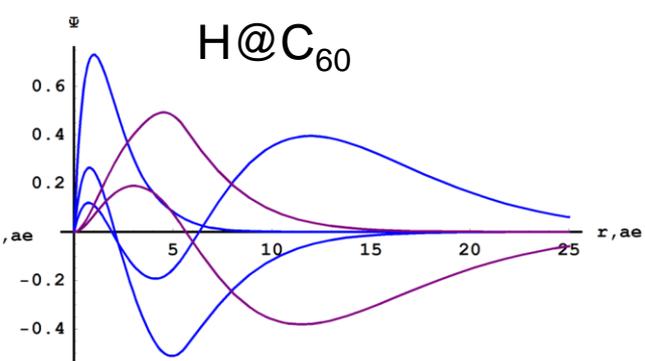
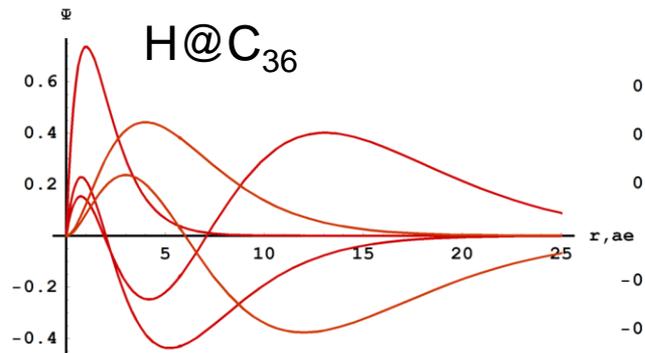
- функции Инфельда и Макдональда

Потенциал $\text{H}@C_{60}$ и $\text{H}@C_{36}$

уровень	H	Яма@C ₆₀	H@C ₆₀	Яма@C ₃₆	H@C ₃₆
1s	-0.5	-0.09697	-0.50014	-0.10323	-0.50187
2s	-0.125	-	-0.17762		-0.16617
2p	-0.125	-0.07122	-0.16312	-0.05084	-0.16416
3s	-0.05(5)	-	-0.05657		-0.06027
3p	-0.05(5)	--0.02580	-0.05757		-0.05752
3d	-0.05(5)	-			



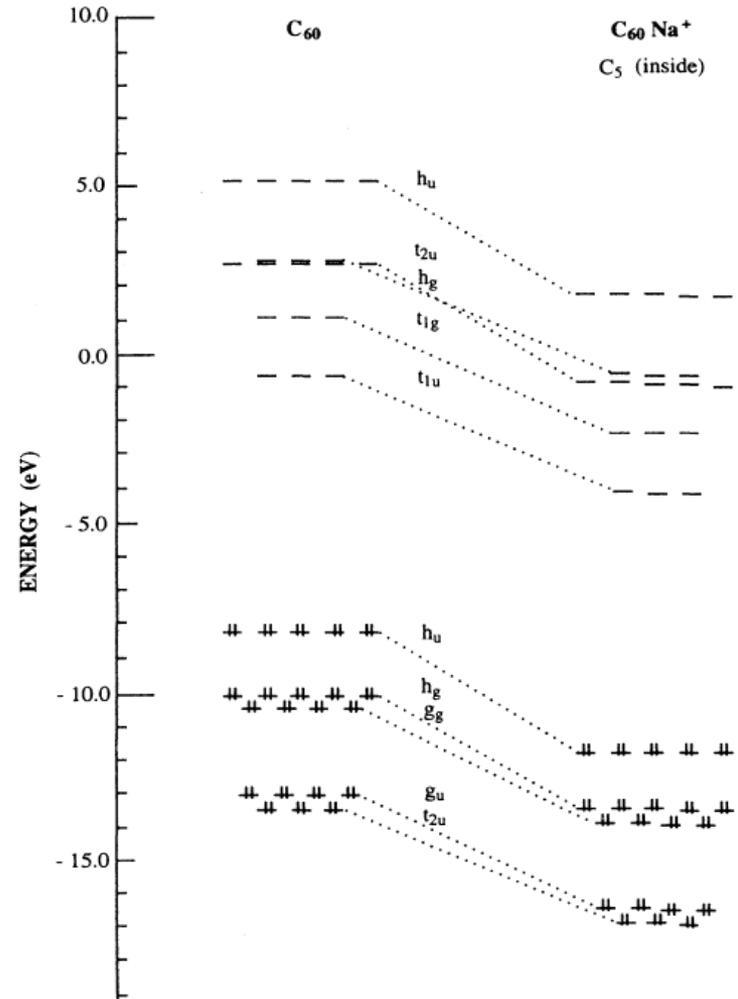
Волновые функции $H@C_{60}$ и $H@C_{36}$



Перестройка спектра фуллера при допировании

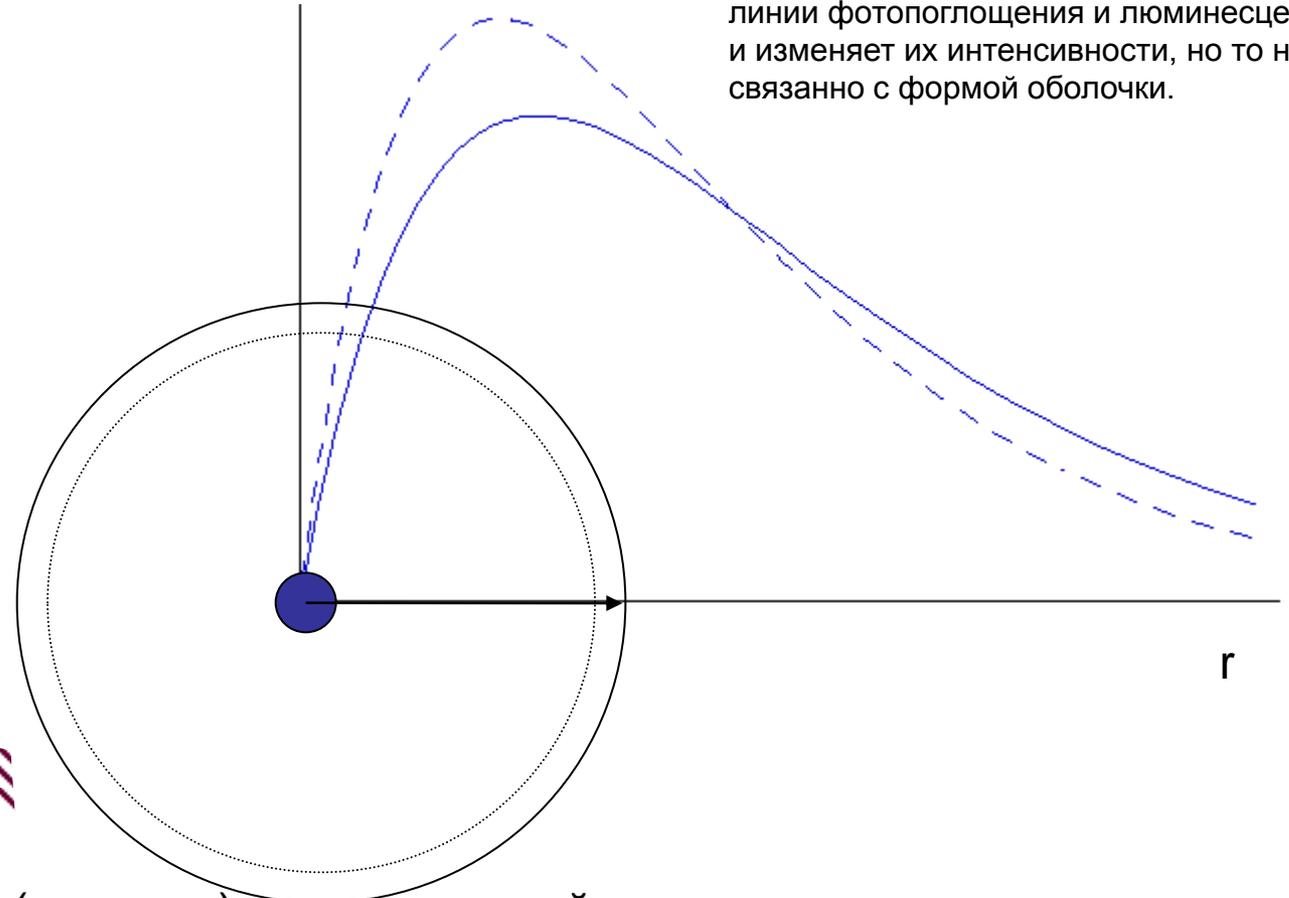
- ✓ Понижение уровней
 - ✓ Стабилизация фуллера
 - ✓ Расщепление уровней из-за понижения симметрии
 - ✓ Увеличение числа линий UPS спектра (ультрафиолетовая фотоэлектронная спектроскопия)
-
- ✓ Изменение ширины зоны запрета

Phys. Rev. A 52, 141 (1995)



Сжатие атомов и молекул

Выбор параметра, характеризующего сжатие нетривиален: например, изменение гидростатического давления сдвигает линии фотопоглощения и люминесценции, и изменяет их интенсивности, но то не связано с формой оболочки.



Потенциал

- Атом в кристалле (матрице) при криогенной температуре
- Атом в фуллерене
- Атомы при высоком давлении (ударные волны)

Константа сверхтонкого расщепления

Векторный потенциал, создаваемый точечным магнитным диполем (ядром) и соответствующее магнитное поле

$$\vec{A} = \frac{[\vec{\mu}_n \times \vec{r}]}{r^3} = \left[\nabla \times \frac{\vec{\mu}_n}{r} \right], \quad A_0 = 0;$$

$$\vec{H} = [\nabla \times \vec{A}] = \nabla \left(\nabla \cdot \frac{\vec{\mu}_n}{r} \right) - \nabla^2 \frac{\vec{\mu}_n}{r},$$

Взаимодействие магнитного момента электрона с магнитным полем

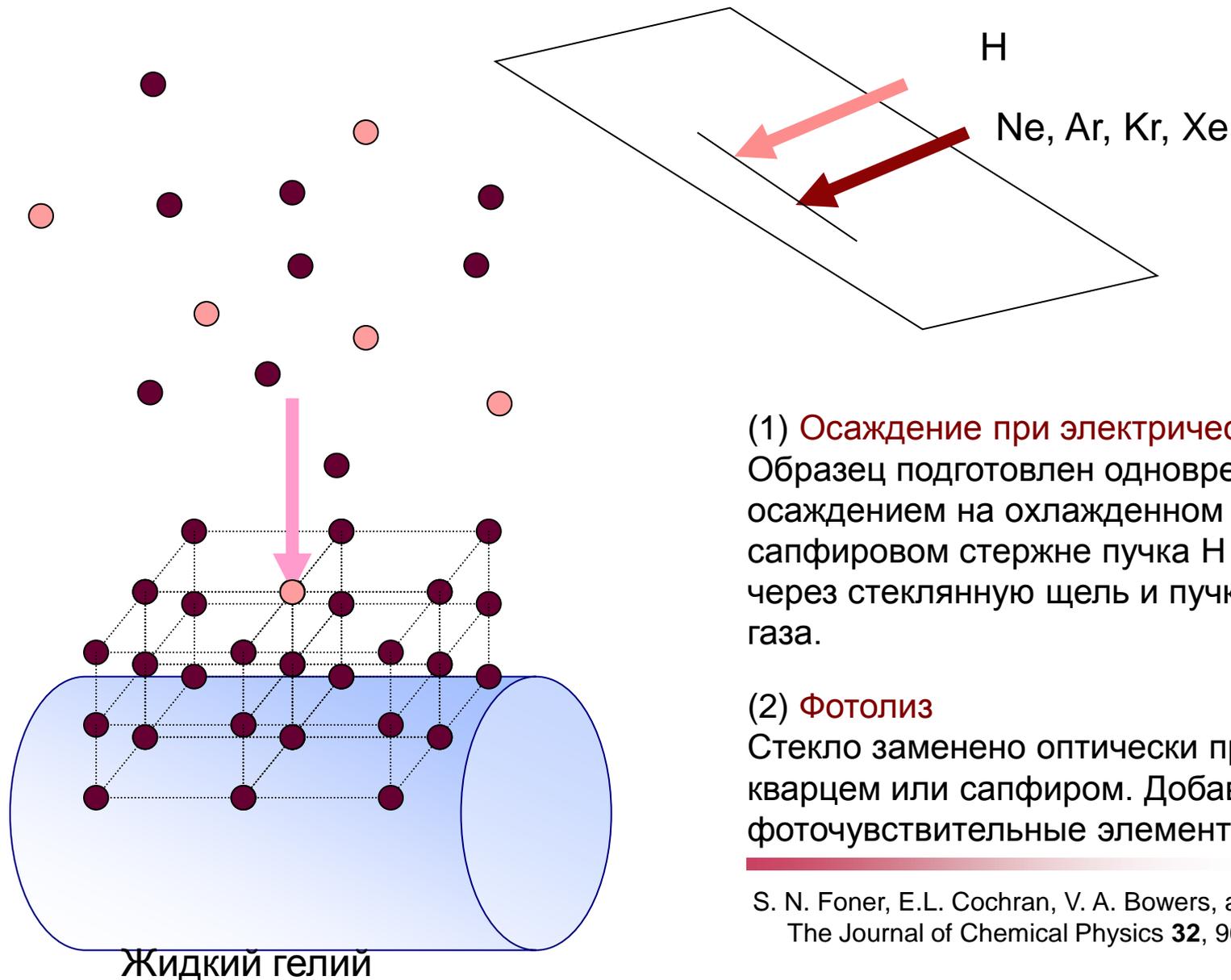
$$\langle \psi | -\frac{e\hbar}{2mc} \sigma H | \psi \rangle = -\frac{e\hbar}{2mc} \langle u | \sigma_z | u \rangle \langle \varphi(r) | H | \varphi(r) \rangle;$$

В первом порядке теории возмущений величина сверхтонкого расщепления

$$\delta E = -\frac{e\hbar}{2mc} \langle \varphi(r) | \nabla^2 \frac{\vec{\mu}_n}{r} | \varphi(r) \rangle = \frac{e\hbar}{2mc} 4\pi \vec{\mu}_n \langle \varphi(r) | \delta(r) | \varphi(r) \rangle = 4\pi \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\mu}_n |\varphi(0)|^2$$

$$a = \frac{8\pi}{3} \mu_e \mu_n |\psi(0)|^2$$

Сжатие атомов в криокристаллах



(1) **Осаждение при электрическом разряде**
Образец подготовлен одновременным осаждением на охлажденном гелием сапфировом стержне пучка H прошедшего через стеклянную щель и пучка инертного газа.

(2) **Фотолиз**
Стекло заменено оптически прозрачным кварцем или сапфиром. Добавлены фоточувствительные элементы

S. N. Foner, E.L. Cochran, V. A. Bowers, and C.K. Jent
The Journal of Chemical Physics **32**, 963 (1960).

Определение величины сжатия

Сверхтонкое расщепление

$$\varphi = (a - a_0) / a_0$$

$$a = \frac{8\pi}{3} \mu_e \mu_n |\psi(0)|^2$$

μ_e , μ_n - магнитные моменты электрона и ядра

atom	matrix	φ (%)	ref	atom	matrix	φ (%)	ref
H	H ₂	-0.23 ^a	2	D	Kr	+0.62 ^b	5
D	D ₂	-0.32 ^a	4	H	Ne	+4.0 ^c	6
H	Ne	-0.10 ^a	4	D	Ne	+5.0 ^c	6
D	Ne	-0.07 ^a	4	H	Ar	+10.8 ^c	6
H	Ar	-0.47 ^a	4	H	Kr	+5.4 ^c	6
D	Ar	-0.53 ^a	4	D	Kr	+8.2 ^c	6
H	Kr	-0.59 ^a	3	H	Xe	-0.97 ^a	5
H	Ne	+0.43 ^b	3	D	Xe	-1.04 ^b	5
H	Ar	+1.15 ^b	3	H	Xe	-1.5 ^c	6
H	Kr	+0.47 ^b	3	D	Xe	-1.8 ^c	6
H	Kr	+0.55 ^b	5				

- ✓ Осаждение при электрическом разряде
- ✓ ФОТОЛИЗ

(2) Jen, C. K.; Foner, S. N.; Cochran, E. L.; Bowers, V. A. *Phys. Rev.* **112**, 1169 (1958).

(3) Foner, S. N.; Cochran, E. L.; Bowers, V. A.; Jen, C. K. *J. Chem. Phys.* **32**, 963 (1960).

(4) Zhitnikov, R. A.; Dmitriev, Y. A. In *Optical Orientation of Atoms and Molecules*; Klementiev, G., Ed.; Physical Institute Press: Leningrad, Vol. **2**, p 109 (1990).

(5) Morton, J. R.; Preston, R. F.; Strach, S. J.; Adrian, F. J.; Jette, A.N. *J. Chem. Phys.* **70**, 2889 (1979).

(6) Knight, L. B.; Rice, W. E.; Moore, L. *J. Chem. Phys.* **109**, 1409 (1998).

Интерпретация величины сжатия

Сверхтонкое расщепление

$$\varphi = (a - a_0) / a_0$$

$$a = \frac{8\pi}{3} \mu_e \mu_n |\psi(0)|^2$$

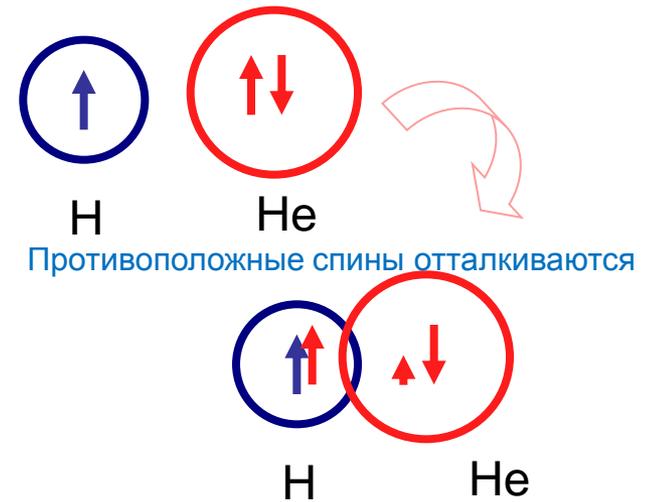
μ_e , μ_n - магнитные моменты электрона и ядра

atom	matrix	φ (%)	ref	atom	matrix	φ (%)	ref
H	H ₂	-0.23 ^a	2	D	Kr	+0.62 ^b	5
D	D ₂	-0.32 ^a	4	H	Ne	+4.0 ^c	6
H	Ne	-0.10 ^a	4	D	Ne	+5.0 ^c	6
D	Ne	-0.07 ^a	4	H	Ar	+10.8 ^c	6
H	Ar	-0.47 ^a	4	H	Kr	+5.4 ^c	6
D	Ar	-0.53 ^a	4	D	Kr	+8.2 ^c	6
H	Kr	-0.59 ^a	3	H	Xe	-0.97 ^a	5
H	Ne	+0.43 ^b	3	D	Xe	-1.04 ^b	5
H	Ar	+1.15 ^b	3	H	Xe	-1.5 ^c	6
H	Kr	+0.47 ^b	3	D	Xe	-1.8 ^c	6
H	Kr	+0.55 ^b	5				

a) газовый разряд;

b) фотолиз;

c) осаждение на SiO₂



➤ Знак изменения характеризует подкачку или утечку электронной плотности на ядре

➤ Два эффекта противоположного знака наблюдаются одновременно. Ван-дер-Ваальсовская делокализация и спиновая поляризация Паули.

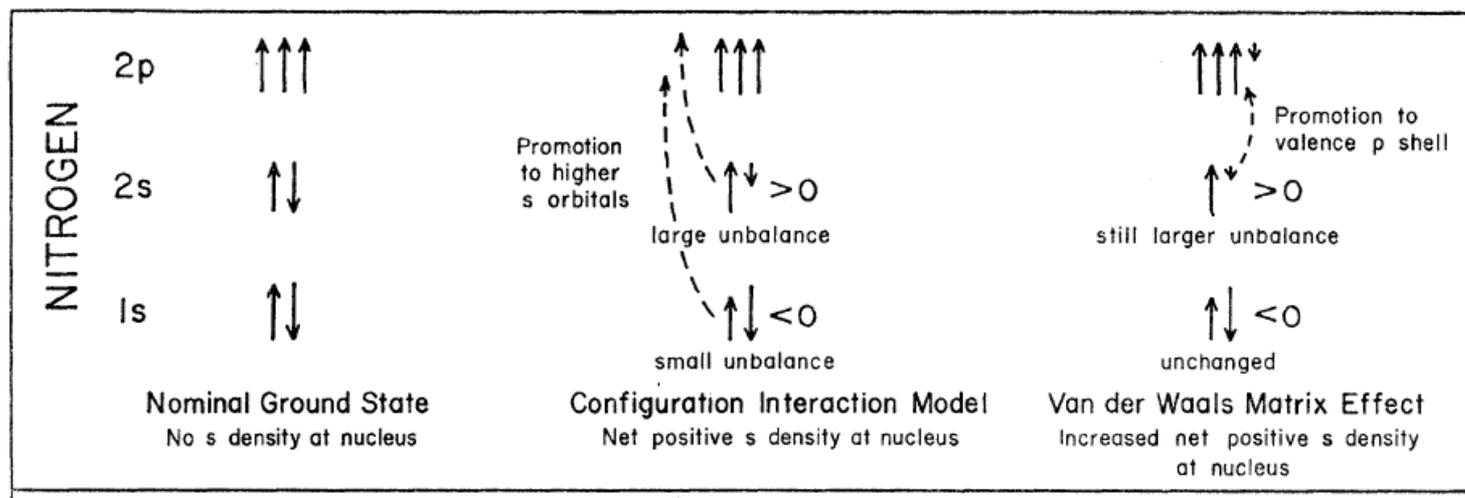
➤ Для слабо поляризуемых атомов матрицы наблюдаются эффекты обоих знаков, но для сильно поляризуемого Хе один

➤ Состояния с положительным ϕ существует намного дольше

Сжатие азота и фосфора (I)

atom	matrix	φ (%)	ref
P	Ar	+19	7
N	H ₂	+9.6	8
N	N ₂	+15.6	8
N	CH ₄	+29.5	8
N	Ne	+7.8	9
N	KN ₃ , crystal	+48.6	10

- Большое изменение (10-50%), связанное с размером атома
- Изменение порядка заполнения оболочек (Ферми назвал этот эффект «электронные переходы под давлением»)



(7) Adrian, F. J.; Cochran, E. L.; Bowers, V. A. *AdV. Chem.* **36**, 50 (1962).

(8) Knight, L. B.; Steadman, J. *J. Chem. Phys.* **77**, 1150 (1982).

(9) Dmitriev, Y. A.; Zhitnikov, R. A. *J. Tech. Phys.* **57**, 1811 (1987).

(10) Wylie, D.; Shuskus, A.; Young, C.; Gilliam, O. *Phys. Rev.* **125**, 451 (1962).

Сжатие азота и фосфора (II)

atom	matrix	φ (%)	ref
P	Ar	+19	7
N	H ₂	+9.6	8
N	N ₂	+15.6	8
N	CH ₄	+29.5	8
N	Ne	+7.8	9
N	KN ₃ , crystal	+48.6	10

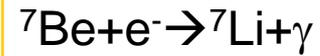
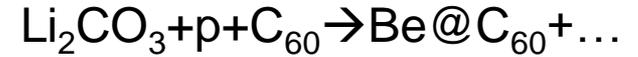
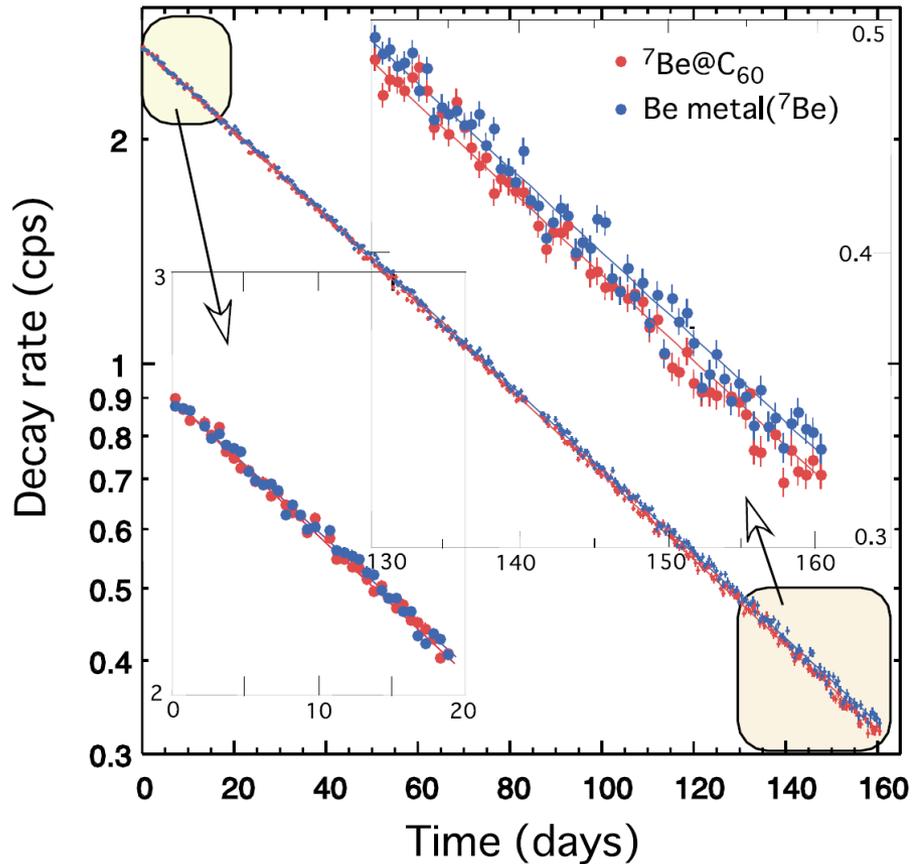
atom	φ (%)	size of cage (Å)	ref
N@C ₇₀	+49.1	7.80 (6.99, equator)	28
N@C ₆₆ (COOC ₂ H ₅) ₁₂	+53.4	7.31	28
N@C ₆₁ (COOC ₂ H ₅) ₂	+54.1		28
N@C ₆₀	+54.1	6.96	27, 28
P@C ₆₀	+250	6.96	29b

- Большое изменение (10-50%), связанное с размером атома
- Изменение заполнения оболочек

- Электронная конфигурация сохраняется
- Энергия связи не превышает 0.9 kcal/mol.
- Значительное изменение константы сверхтонкого расщепления 50%
- Сверхтонкое расщепление чувствительно к химическому соединению
- Структура подтверждается теоретическим анализом

- (27) Pietzak, B.; Waiblinger, M.; Murphy, T. A.; Weibinger, A.; Höhne, M.; Dietel, E.; Hirsch, A. *Chem. Phys. Lett.* **279**, 259 (1997).
 (28) Dietel, E.; Hirsch, A.; Pietzak, B.; Waiblinger, M.; Lips, K.; Weidinger, A.; Gruss, A.; Dinse, K.-P. *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 2432 (1999).
 (29) (a) Weiden, N.; Goedde, B.; Käss, H.; Dinse, K.-H.; Rohrer, M. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1544 (2000).
 (b) Knapp, C.; Weiden, N.; Käss, H.; Dinse, K.-P.; Pietzak, B.; Waiblinger, M.; Weidinger, A. *Mol. Phys.* **95**, 999 (1998).

β-распад



Период β-распада [*]

Host materials	$T_{1/2}$ (days)	References
C_{60}	52.68 ± 0.05	This work
Beryllium metal	53.12 ± 0.05	This work
Lithium fluoride	53.12 ± 0.07	[5]
Graphite	53.107 ± 0.022	[8]
Boron nitride	53.174 ± 0.037	[8]
Tantalum	53.195 ± 0.052	[8]
Gold	53.311 ± 0.042	[8]

Электронная плотность[**]

	Orbitals			Total
	1st	2nd	Others	
$\text{Be}@\text{C}_{60}$	34.22	1.24	0.02	35.48
Be atom	34.25	1.13	–	35.38
Be metal	34.11	0.32	0.33	34.78

[*] T. Ohtsuki, H. Yuki, M. Muto, J. Kasagi and K. Ohno *Phys. Rev. Lett.* **93** 112501 (2004).

[8] E. B. Norman et al., *Phys. Lett. B* **519**, 15 (2001).

[**] E.V. Tkalya, A.V. Bibikov, and I.V. Bodrenko *Phys. Rev. C* **81**, 024610 (2010).