

关于 Hg5461Å 光谱图中各峰的一种尝试性解释

杨银

(复旦大学材料科学系 上海 200433)

摘要: 用汞原子的超精细结构理论计算了产生 Hg5461Å 谱线的两能级的进一步分裂, 从而解释了 Hg5461Å 谱图中各峰是如何产生的。

Abstract: The author calculated further splits of Hg's $6s7s^3S_1$ and $6s6p^3P_2$ energetic stages under the theory of hyperfine structure. On the basis of the calculation, the author explained how the spectral lines around Hg's 5461Å-spectra was produced.

关键词: 原子光谱图; 超精细结构常数; 核自旋; 汞原子

Keywords: atomic spectral pictures; hyperfine structure dipole; atomic nucleus spin; Hg atom

在做“塞曼效应”实验时, 笔者发现当没有外加磁场时, 由 F-P 气压扫描式标准具扫描出的 Hg5461Å 光谱图中, 除了主峰外, 周围还出现了一系列小峰。笔者根据谱图粗略估算了一下各小峰与主峰之间的能量差, 约为 10^{-5} eV 量级, 如此之小的能级分裂笔者推测是由汞原子的超精细结构引起的能级进一步分裂导致的, 后经过计算证明了笔者的推测是正确的。原子核具有自旋角动量, 由此产生的原子核固有磁矩与核外电子产生相互作用, 这种作用使得原子的精细结构进一步分裂, 其能级分裂比精细结构还要小三个数量级。除了原子核磁矩以外, 原子核的电四极矩以及同位素质量的差异也会引起原子能级的超精细分裂。笔者在此主要是根据汞的各种同位素的原子核磁矩与核外电子相互作用导致的超精细能级分裂理论来解释 Hg5461Å 光谱图中的各峰的来源。

一 理论分析

1. 基础理论

①超精细结构附加能的计算

设原子核的自旋角动量为 I , 与之相联系的核磁矩 μ 定义为

$$\mu = g_I \frac{e}{2m_p} I$$

其中 g_I 是原子核的朗德 g 因子, m_p 是质子质量。电子的运动会在原子核处产生一磁场 B_e , 这个磁场作用于原子核的磁矩, 从而对原子能级贡献一个附加项 E_{SF} 。由于核磁矩 μ 与核自旋角动量 I 成正比, 而磁场 B_e 与电子总角动量 J 成正比于是有

$$E_{SF} = GI \cdot J$$

其中 G 称为超精细结构常数。考虑了原子核自旋以后, 孤立原子体系总角动量 F 为

$$F = I + J$$

F 的量子数取值为

$$F = |J-I|, |J-I|+1, \dots, J+I-1, J+I$$

量子力学计算得出, 附加能量 E_{SF} 可以用量子数表示为

$$E_{SF} = \frac{G}{2} \cdot K \quad (1)$$

其中 $K = F(F+1) - J(J+1) - I(I+1)$ 。

②跃迁选择定则

除了遵守一般能级间的跃迁定则外,对于超精细结构间的能级跃迁需要附加一个对于总角动量 F 量子数的约束:

$$\Delta F = 0, \pm 1 (0 \rightarrow 0 \text{ 不允许})$$

③关于核自旋量子数的经验规律

实验结果表明,若原子质量数为偶数,其核自旋量子数 I 为整数;若原子质子数和质量数均为偶数,则其核自旋为零;若原子质量数为奇数,则其核自旋量子数 I 为半整数。

下面笔者将基于以上理论对 Hg 原子的情况做具体计算。

2. Hg 原子超精细结构能级的计算

Hg 原子质子数 $Z=80$, 自然界中汞有七种同位素,它们的质量数及丰度如表一所示:

表一 Hg 原子同位素及其丰度

质量数	196	198	199	200	201	202	204
丰度 (%)	0.146	10.02	16.84	23.13	13.22	29.8	6.85

由表中不难看出, ^{196}Hg 、 ^{198}Hg 、 ^{200}Hg 、 ^{202}Hg 和 ^{204}Hg 的质量数均为偶数,可以判定它们核自旋量子数 $I=0$, 不会产生由核磁矩引起的超精细结构能级分裂。因此我们只需考虑 ^{199}Hg 和 ^{201}Hg 的核自旋引起的超精细结构。

① ^{199}Hg 的超精细能级

Hg 的 5461\AA 谱线是 Hg 原子由 $6s7s^3S_1$ 能级向 $6s6p^3P_2$ 能级跃迁而发出的。 ^{199}Hg 的自旋量子数 $I_{199} = \frac{1}{2}$, 由于核自旋的作用 3S_1 将分裂为两个子能级, 总角动量分别为 $F = \frac{1}{2}$ 和 $F = \frac{3}{2}$, 假设 ^{199}Hg 的 3S_1 能级精细结构常数为 $G_1(199)$, 将 $I = \frac{1}{2}$, $J=1$ 代入公式 (1) 算得其附加能量 E_{SF} 分别为 $\frac{G_1(199)}{2}$ 和 $-G_1(199)$ 。

同理, 核自旋将使 3P_2 分裂为两个子能级, 总角动量分别为 $F = \frac{3}{2}$ 和 $F = \frac{5}{2}$, 假设 ^{199}Hg 的 3P_2 的精细结构常数为 $G_2(199)$, 同样由公式 (1) 可得其附加能量分别为 $G_2(199)$ 和 $-\frac{3G_2(199)}{2}$ 。

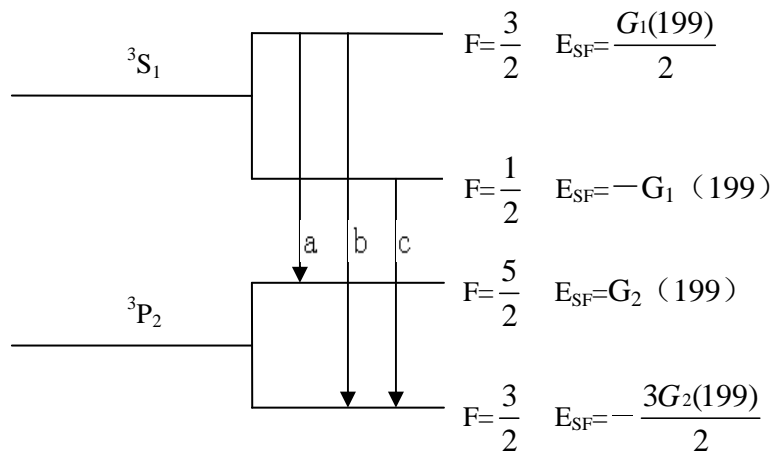


图 1 ^{199}Hg 精细结构能级跃迁图

据此可以画出考虑 ^{199}Hg 的超精细结构后可能发生的跃迁图如图 1 所示：

结合上图不难算出考虑超精细结构后，a、b、c 跃迁所对应的光子能量与原主线所对应的光子能量之差 ΔE_{SF} 分别为：

$$\text{a 线: } \Delta E_{SF(a)} = \frac{G_1(199)}{2} - G_2(199);$$

$$\text{b 线: } \Delta E_{SF(b)} = \frac{G_1(199)}{2} + \frac{3G_2(199)}{2};$$

$$\text{c 线: } \Delta E_{SF(c)} = -G_1(199) + \frac{3G_2(199)}{2}。$$

② ^{201}Hg 的超精细结构

^{201}Hg 原子的核自旋量子数 $I_{201} = \frac{3}{2}$ ，假设 ^{201}Hg 的 3S_1 和 3P_2 能级的超精细结构常数分别为 $G_1(201)$ 和 $G_2(201)$ ，按照与 ^{199}Hg 相似的分析方法可以画出其超精细结构的能级跃迁图如图 2 所示。同样可以算出上图八条谱线与原主线偏离的能量差值分别为：

$$\text{d 线: } \Delta E_{SF(d)} = \frac{3G_1(201)}{2} - 3G_2(201);$$

$$\text{e 线: } \Delta E_{SF(e)} = \frac{3G_1(201)}{2} + \frac{G_2(201)}{2};$$

$$\text{f 线: } \Delta E_{SF(f)} = \frac{3G_1(201)}{2} + 3G_2(201);$$

$$\text{g 线: } \Delta E_{SF(g)} = -G_1(201) + \frac{G_2(201)}{2};$$

$$\text{h 线: } \Delta E_{SF(h)} = -G_1(201) + 3G_2(201);$$

$$\text{i 线: } \Delta E_{SF(i)} = -G_1(201) + \frac{9G_2(201)}{2};$$

$$\text{j 线: } \Delta E_{SF(j)} = -\frac{5G_1(201)}{2} + 3G_2(201);$$

$$\text{k 线: } \Delta E_{SF(k)} = -\frac{5G_1(201)}{2} + \frac{9G_2(201)}{2}。$$

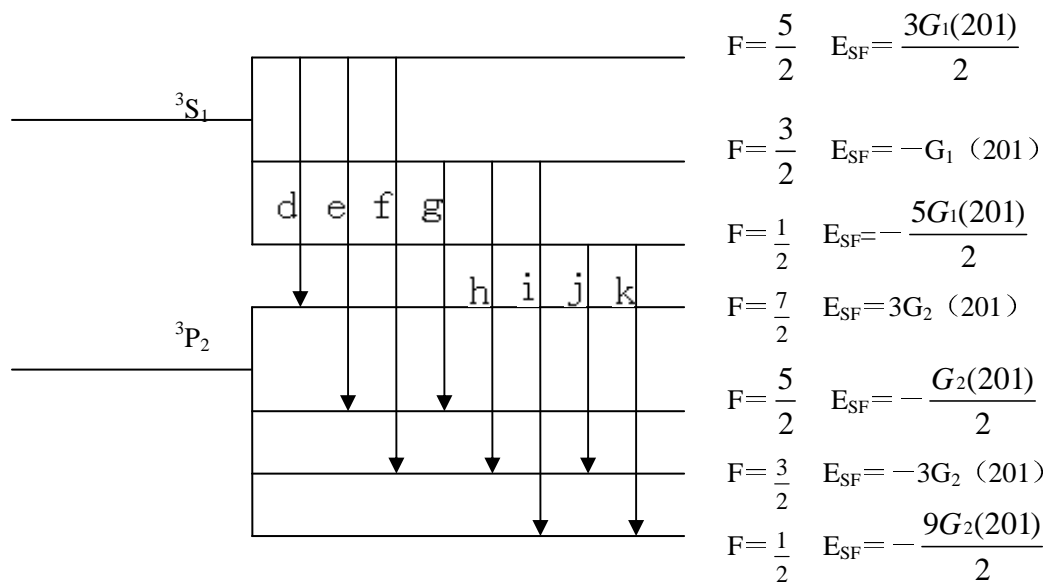


图 2 ^{201}Hg 精细结构能级跃迁图

③将能量差换算成波数差

设 Hg 原子 5461Å 谱线的光子能量和波数分别为 E_0 和 ν_0 ，考虑精细结构后各跃迁对应的光子能量和波数分别为 E_i 和 ν_i ，由

$$\Delta E_{SF} = E_i - E_0 = hc\nu_i - hc\nu_0 = hc\Delta\nu$$

得

$$\Delta\nu = \frac{\Delta E_{SF}}{hc}$$

利用上式，将理论值 $G_1(199) = 8.94 \times 10^{-5} eV$ ， $G_2(199) = 3.80 \times 10^{-5} eV$ ， $G_1(201) = -3.29 \times 10^{-5} eV$ ， $G_2(201) = -1.39 \times 10^{-5} eV$ 代入，可以算得各跃迁偏离 5461Å 的波数差理论值如下表(按波数差从小到大顺序排列)：

表二 各线与 5461Å 谱线波数差

序号	f	e	c	i	h	d	a	k	g	j	b
波数差(m^{-1})	-73.35	-45.35	-26.00	-23.90	-7.10	-6.15	5.35	15.85	20.90	32.65	81.85

二 实验结果与分析

图 3 是笔者在做塞曼效应实验时在未加外磁场情况下得到的 Hg 原子 5461Å 光谱图。

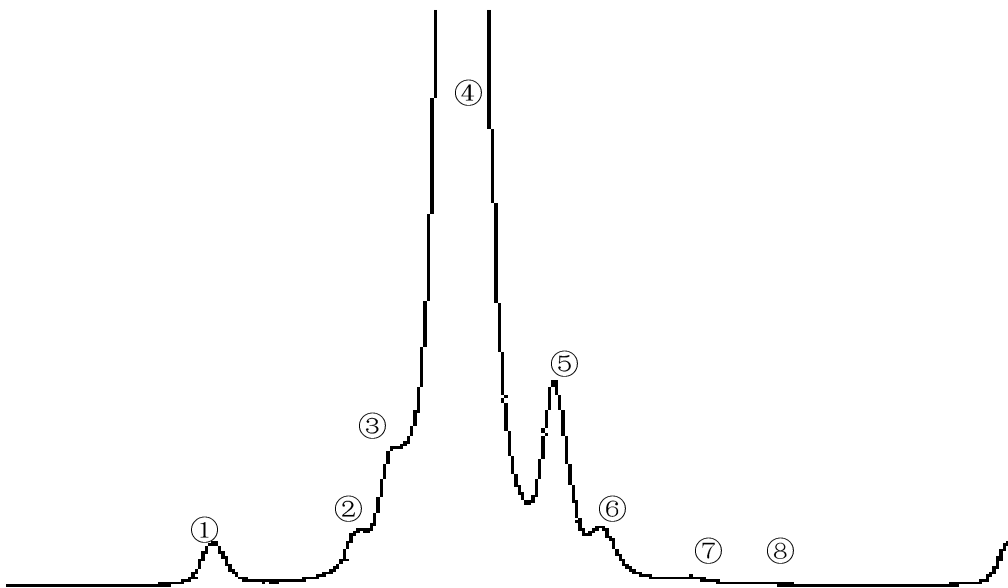


图 3 实验测得的 Hg 光谱图

根据光谱图可以算出各小峰与主峰④的波数差，如表三所示：

表三 各峰与主峰波数差

峰序号	①	②	③	⑤	⑥	⑦	⑧
波数差 (m^{-1})	-77.28	-31.19	-18.62	29.96	45.12	75.19	101.34

对比表二与表三，可知主峰④对应的必定是 a 线，于是可将表二中各线以主峰(a 线)为基准进行修正，修正结果如表四所示：

表四 各线与 a 线波数差及对应峰

序号	f	e	c	i	h	d	a	k	g	j	b
波数差(m^{-1})	-78.70	-50.70	-31.35	-29.25	-12.45	-11.50	0	10.50	15.55	27.30	76.50
对应峰	①		②				④			⑤	⑦

三 小结

由表四可以看出,对于峰①②④⑤⑦,实验值与理论值符合得较好,可见笔者的这种尝试性解释在一定程度上是合理的;另一方面,该解释又存在着以下两方面的严重缺陷:

其一,无法解释峰③、峰⑥和峰⑧产生原因。笔者在该文引言中曾经提到过,除了原子核磁矩以外,原子核的电四极矩以及同位素质量的差异也会引起原子能级的超精细分裂,而笔者在计算中为了简化起见,只考虑了核自旋引起的超精细能级分裂,因此无法解释峰③、峰⑥和峰⑧的来源。由此笔者有理由相信,峰③、峰⑥和峰⑧是由 Hg 同位素效应以及核电四极矩与价电子相互作用引起的超精细分裂而产生的。

其二,笔者用核自旋超精细理论算出的某些跃迁谱线(如 e、i、h、d、k、g 线)在实验图谱中并未找到对应的峰。这一方面是由于谱线都具有一定的自然展宽和多普勒展宽,另一方面由于实验仪器分辨能力有限,当强度很弱的峰和强度较强的峰比较靠近时,弱峰会被强峰所“淹没”导致我们无法观测到所有理论上应该出现的谱线。如果用比 F-P 标准具分辨率更高的仪器进行实验,笔者有理由相信会观察到更多的峰。

参考文献:

- 1 王正行. 近代物理学. 北京: 北京大学出版社, 1995.
- 2 戴乐山. 近代物理实验. 上海: 复旦大学出版社, 1994.
- 3 林美荣, 张包铮. 原子光谱学导论. 北京: 科学出版社, 1990.
- 4 陈星, 潘正权. Hg 绿谱线超精细结构分析及相互作用常数计算. 大学物理, 2004, 6.