

Astronomical
Spectroscopy

$z = 1100$ CMB.



Dark age



$z = 20 \sim 30$ 第一代恒星、黑洞



$z = 6 \sim 10$ reionization of hydrogen & helium ($z \approx 2$).
AGN.



$z = 1 \sim 2$

宇宙加速膨胀

large ~~set~~ scale structure.



galaxy cluster.



galaxy.

Dark matter & Dark energy. Zero result?

which theory?

恒星光谱、电离氢区、分子云、弥散星云。

类星体吸收线、Shock.

Stella (Sun) Spectrum.

Photosphere.

~5800 K

LTE. Black body radiation.

天文水在红外波段的吸收.

短波散射强.

atmospheric ~~odd~~ window.

紫外、红外、射电

近红外、中红外.

远红外、毫米波.

850 / 450, 350 μm . 窗口.

Radio transparent.

推测星系年龄.

AGN unification model.

Type 1 奎星体壳

连续谱 + 一系列发射线.



power law.



optical thick Accretion Disk.

不同温度冕层谱的叠加. 最高能到 SXR.

Gamma Ray / HXR. Inverse Compton Scattering
Brodened Line Region. (charged particle \rightarrow photon energy)

视日吸黑洞引力束缚 emission line

(强度大) \leftarrow already ionized. (by high energy photon from AD).
Doppler broaden. \downarrow recombination \rightarrow emission line

Narrow Line Region.

不被引力束缚、密度低。Forbidden Lines.

尘埃环：近吸黑体热辐射。(Obscuring Torus).

Jets. Sgr A* Synchrotron Emission Radiation.

吸收线：星际介质 (成吸收)

宽吸收：Broad Absorption.

C IV. Lyman α

Blue wing.

Spectral Line. molecules

Which Atom/Ion/~~molecular~~?

Transition from which two states?

(Physical environment: T, p, L.

Weight/Abundance/Doppler Effect

Line Profile: broadening? pressure / Doppler
Line split \rightarrow magnetic field.

Crofton map.

内禀强度. double line?

stationary wavelength?

Diffuse Interstellar Bands? Unknown Lines.

测光(成像)观测.

单色元. 多色元观测. multi-passband.

↓
误差. 直行. 变源 (变星. Supernova. Gamma burst)

射光. 天体在空间中的性质. ---

大气透明度. 宇宙度. 天光背景. 稳定度.

自适应光学

无缝光谱: prism.

全部泛光.

分辨率率低. 天光背景高. 不同天体光谱叠加.

长(窄)缝观测. (B & C Spectrograph).

\rightarrow Slit \rightarrow Filter \rightarrow Collimator \rightarrow Grating \rightarrow CCD.

氫原子の量子力学描述.

Wave Function

$$\text{Plain Wave } \psi = \psi_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}.$$

$$\text{wave number } k = \frac{2\pi}{\lambda}.$$

$$\text{momentum } p = \hbar k = \frac{\hbar}{\lambda}.$$

$$\text{energy } E = \hbar \nu = \hbar \omega.$$

Wave Function of a free particle.

$$\psi = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{x} - Et)}.$$

Schrödinger Eq.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi.$$

定态 Schrödinger Eq.

$$E \psi = \hat{H} \psi \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r).$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r).$$

Hydrogen Atom.

$$E \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} \right) \psi.$$

Solution:

$$\psi = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi).$$

能量. $E_n = -\frac{me^4}{2n^2\hbar^2}$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = 0, 1, \dots, n-1$$

s p d f ...

$$m = -l, \dots, l.$$

轨道角动量 $\sqrt{l(l+1)} \hbar$.

光学、紫外 \AA

红外 μm	J band	H band	K band
1.2	1.55-1.6	2.2	

波数 cm^{-1}

$$\delta \tilde{v} = \frac{\delta \lambda}{\lambda^2}$$

射电

$$1 \text{ cm}^{-1} \sim 30 \text{ GHz}$$

$$21 \text{ cm} \sim 1.4 \text{ GHz}.$$

高能. eV. keV.

$$1 \text{ eV} \sim 1.6 \times 10^{12} \text{ ergs.} \quad 1 \text{ cm}^{-1} \sim 1.4388 \text{ K.}$$

$$\sim 11600 \text{ K}$$

大元折射率 真空和大元波长.

Doppler 位移.

$$V_r = c \frac{\Delta \lambda}{\lambda}$$

分辨率本领 $R = \frac{\lambda}{\Delta \lambda}$ $R = 3 \times 10^4 \sim 10 \text{ km/s}$.

$$\tau(n) = R_H / n^2$$

$$\tilde{D} \propto (n_2 - n_1) = \tau_{n_1} - \tau_{n_2}$$

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Lyman 系 $\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}$ 紫外

Balmer 系 $\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}$ 光学

Paschen 系 $\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}$ 红外

Brackett 系 $\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2}$ 红外

Pfund 系 $\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2}$

Δn 较小. $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon$.

Δn 较大. 直接用 n_2 表示

Lyman 系限 $912 \text{ \AA} \sim 13.6 \text{ eV}$.

Balmer 系限 3646 \AA

planetary nebula \rightarrow emission.

Balmer Series (Optical).

$H\alpha$. & $H\beta$.

$H\alpha$ 6563.1 \AA

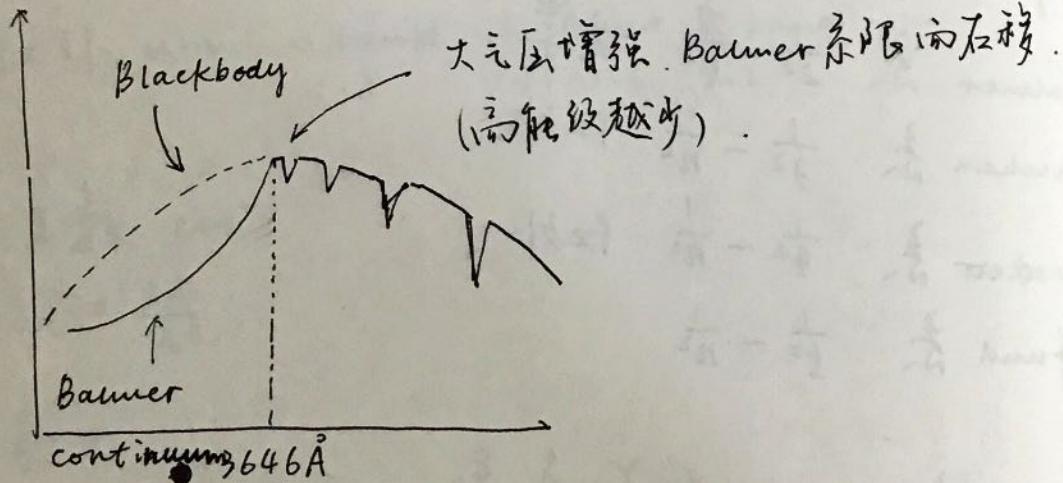
$H\beta$ 4861 \AA

$H\gamma$ 4340 \AA

limit ~~→~~ 3640 \AA

氢原子谱线 A₀星达到最大

Balmer 連續譜与 Balmer 跃变.



星系中的 Balmer 线

Initial mass function. \sim power law -2.35 .

星系形成初期，光谱主要由 O-A 型星决定，伴有非常强的发射成（氢）
随着 O-A 型星的死亡，远离光子 ($E > 13.6 \text{ eV}$) 变少。

Balmer jump 变强.

最后只剩下一些小质量恒星.

Blue galaxy
↓
red galaxy.

3727
O^{II}; O^{IV} & H β ; H α ;
Mg; Na.

发射线与吸收线共存.

H α & H β 线的重要性.

SFR star formation rate

$$SFR (M_{\odot} \text{ yr}^{-1}) = 7.9 \times 10^{-42} L(H\alpha) \text{ ergs s}^{-1}$$

(most accurate)

UV; O^{II} 3727 double; FIR

(尘埃消光) (尘埃再辐射)

AGN 反响映射实验 (reverberation mapping).

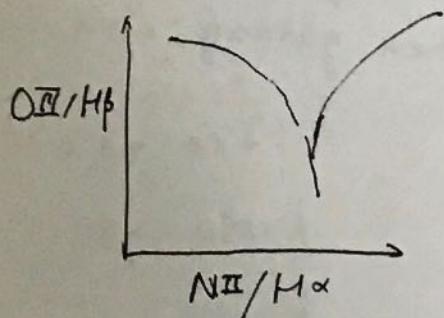
$$M_{BH} = f \frac{R \Delta V^2}{G} \xrightarrow{\text{FWHM}} \text{Mass of the black hole in AGN.}$$

来自 continuum & broaden Line region

光变的延迟.

R-L关系也可以

BPT Diagram.



Balmer jump.

推算星系年龄.

同位素位移.

Lyman线系

高红移天体 $UV \rightarrow visible$.

Lyman α 1216\AA (高能级 \leftrightarrow 基态, 最强).

Lyman β 1026\AA

Ly γ 973\AA

吸收.
但需要热恒星提供
UV背景黑体谱.

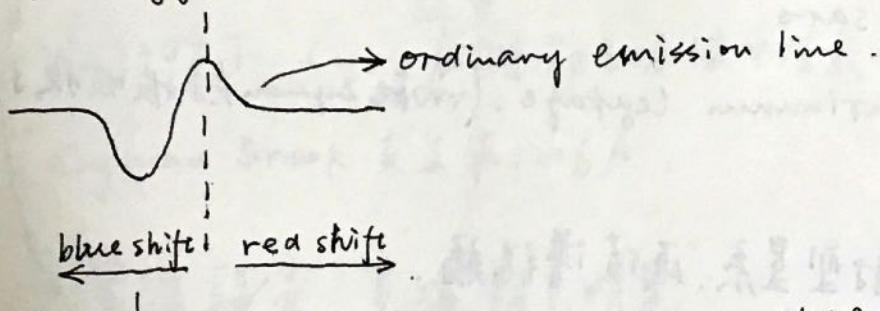
IUE, HST 可以观测到 Ly α . 但无法观测到更高的 Lyman 谱线

FUSE $900\text{\AA} \sim 1200\text{\AA}$ 包含 Lyman limit 912\AA .

星际介质中基态氢时 Ly α 吸收强.

Ly α 容易被地冕发射干扰.

P-Cygni line profile



absorption from ejected materials along LOS.

恒星，大量的 Lyman 吸收线.

Ly α & NV.

AGN. 由离氯区、宽线区。Lyman 发射线很亮，与其线相互重叠。

Lyman 线 jump 不明显。
(Ly α 及以上几乎看不清).

贫金属星系与光谱.

星际介质的 Lyman 线吸收，不同红移 α 线吸收.

$\lambda < 912 \text{ \AA}$ ionizing photon.

Photoionization 在阈值处电离概率最大，随波长减小急剧下降.

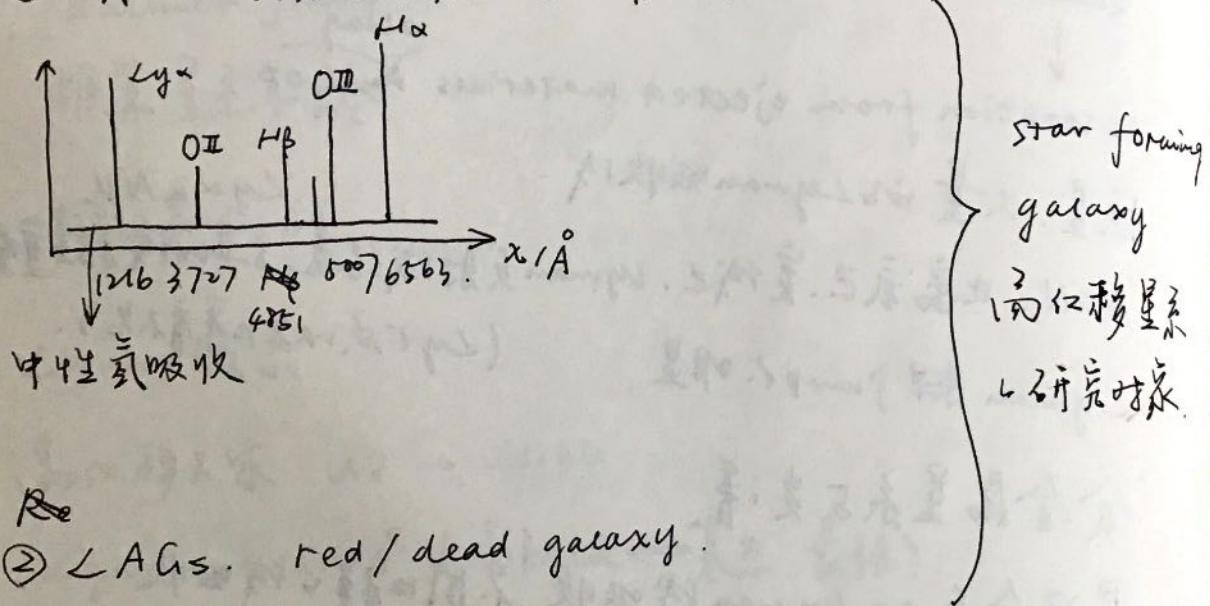
星系光谱中的 Lyman α .

高红移 Lyman $\alpha \rightarrow$ Optical.

可以从地面观测.

- ① Ly α emitters (LAzs).
- ② Lyman-break galaxies (LAGs)
- ③ AGN / Quasars.
- ④ Lyman continuum leakage. (高能 Lyman 光子被吸收了)

① LAzs. 发射型星系，连续谱很弱。



② LAGs. red / dead galaxy.

Black Body + absorption lines.

Balmer break / Lyman break.

Ly α 蓝翼的全部吸收.

③ Quasar.

高红移 ($z \geq 2$).

Ly α 发射线往往最重要

Mg II & C IV.

PG Quasar $z \approx 1 \sim 2$.

How to find high- z galaxies.
Drop out technique LBGs. → 通过~~几~~^长光带估计
Narrow-band ~~too~~ technique LAzs

高红移下, $\text{Ly}\alpha$ 蓝翼 ~~左端~~ 部已经被中性氢吸收.

Cyman Break 发生在 1216\AA .

窄波段亮, 宽波段不明显.

↓
发射线, 估计红移.

高激发态谱线 → AGN emitter?

Lyman continuum emission.

能量高于 Lyman limit → 光子逃不出去.

$z \approx 3$ 左右 Lyman continuum 光子逃逸率 $\sim 5\%$.

宇宙再电离? $\Rightarrow z = 6 \sim 10$ 还有光逃出来吗?

观测上始终是 0 信号.

* A Lyman break galaxy at $z = 11.09$?

红外线条.

Paschen...

Super Nova. 高密度、高温、电离.

复合与复合成，电离区

电离 H + 自由电子 → 电子 - → 自发向下游进。

冷却过程。(电子失去动能，以辐射形式放出)。

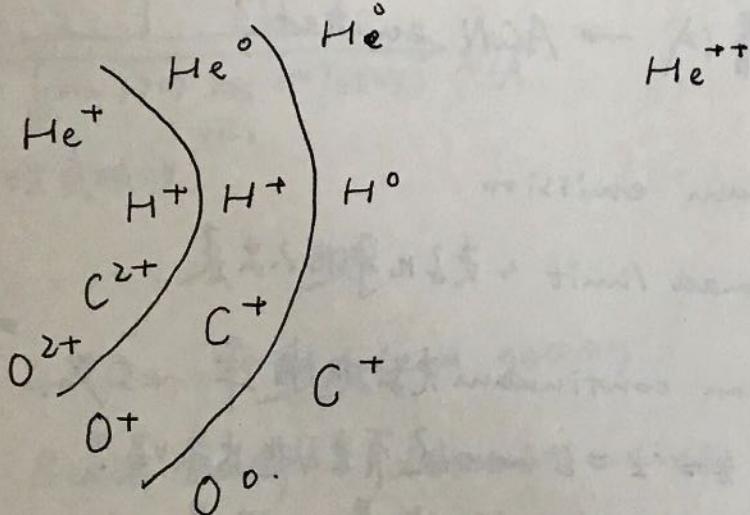
行星状星云、Super Nova. Star burst galaxy.

(急剧恒星形式)。

塞佛特星系 (中心有大质量黑洞)

H II $T < 40000 \text{ K}$

行星状星云. $T > 40000 \text{ K}$



电离区

恒星表面的。

极度解离之来自电离源一炽热辐射。能量密度 \propto 有效温度
分布

度远小于色温度，辐射占主导。

主要冷却是更重粒子 ~~复合~~、激发。

电子平均动能较低，与光子碰撞可忽略。

除 Balmer 族吸收与发射线外，还有重原子的禁域。

射电复合成。

来自于高能级间跃迁（由于粒子密度小，高能级原子可以存在）
电离氢区的最高吸收测到 $n=300$ 。

H I α 落在 21 cm 波长旁边。

射电波段 ~ Rayleigh-Jeans' ~~tail~~ tail.

\Rightarrow Black Body ~ Temperature.

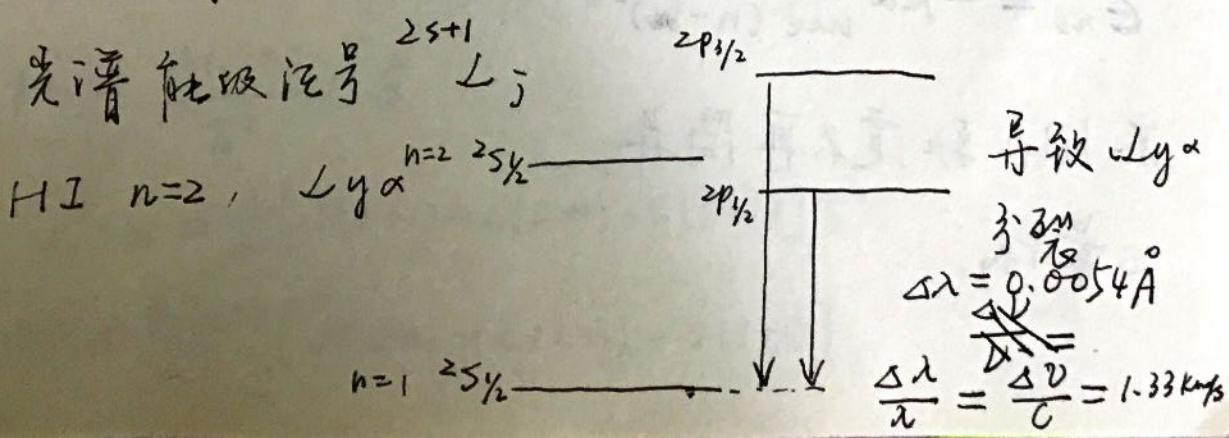
He 114 α 强度大于 C 114 α 强度，原因是 H, He, C
来自不同区域。He 电离势较高，故所在区域压强较
明显。

原子运动量。

l, s, i.

Fine Structure.

Coupling of l, s & Relativistic effect.



Hyper-Fine structure.

$1s^2 S_{1/2}$ $f = 0$ 或 1.

强度分布中性 H
 $21\text{cm. } 1.4\text{ GHz}$ 几乎完全薄. 从而速度 profile FWHM
 温度.

碱金属原子 Alkali metals.

Li, Na, K, Rb, Cs, Fr.

Li-like CIV, NV, OVI. C.N.O cycle.

Na-like Mg-II Al-II, Si-IV.

K-like Ca-II.

C, O, Mg, Ca. α -elements.

formed by nuclear fusion of He

old/red galaxy no emission line.

broad emission line - ACN.

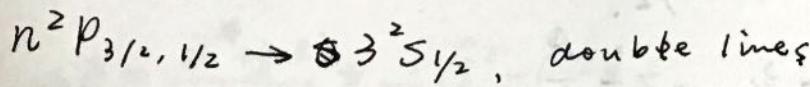
$$E_n = -R_\infty \frac{\mu}{m_e} \frac{1}{(n - \delta n)^2}$$

不同轨道不再简并.

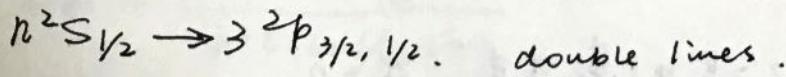
S 最低.

Na spectrum series.

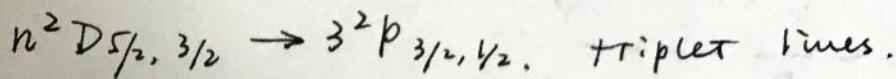
principle series.



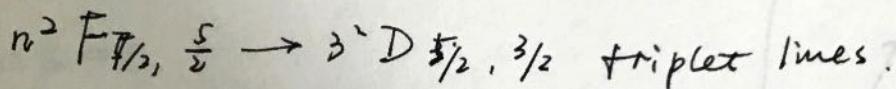
sharp series.



diffusive series.



fundamental series.



Croatian.

L_i

$$\delta_{L=0} \sim 0.4.$$

$$\delta_{L=1} \sim 0.05$$

$$\delta_{L=2} \sim 0.001$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2me} \quad \hat{n}_S = -2 \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{S}$$

$$\hat{H}_1 = \frac{A(L,S)}{\hbar^2} \hat{L} \cdot \hat{S}$$

$$\hat{L} \cdot \hat{S} = \frac{1}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] \hbar^2$$

$$\Delta Z = \frac{A(L,S)}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)].$$

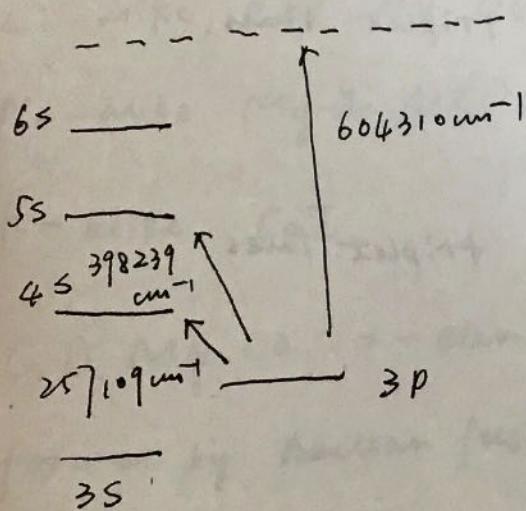
NaI.

$$3^2P_{3/2}, 1/2 \rightarrow 3^2S_{1/2}.$$

NaID. $J = \frac{3}{2}$ $\Delta Z = \frac{A}{2}$
 $J = \frac{1}{2}$ $\Delta Z = -A$.

对外壳层电子满足数半数. $A > 0$.

ex: S VI Na-like.



$$\lambda_{4s \rightarrow 3p} = R_\infty \left[\frac{1}{(4 - \delta_{l=0})^2} - \frac{1}{(3 - \delta_{p,l=1})^2} \right] Z_{\text{eff}}^2$$

$$\lambda_{5s \rightarrow 3p} = R_\infty \left[\frac{1}{(5 - \delta_{l=0})^2} - \frac{1}{(3 - \delta_{p,l=1})^2} \right] Z_{\text{eff}}^2$$

$$\lambda_{6s \rightarrow 3p} = R_\infty \frac{Z_{\text{eff}}^2}{(3 - \delta_{l=1})^2}$$

$$\lambda_{6s \rightarrow 3p} = \dots$$

精细结构分裂量级

$$\mu_s = \frac{e}{m} \sqrt{s(s+1)} \hbar$$

$$\Delta Z = \frac{Z_{\text{eff}} e^2}{2m^2 c^2 \hbar} \frac{1}{r^3} \frac{j^2 - l^2 - s^2}{2}$$

$$\overline{\Delta Z} = \frac{R c h \alpha^2 Z_{\text{eff}}^4}{n^3 l(l+1/2)(l+1)}$$

$$\Delta Z_r = - \frac{R c h \alpha^2 Z_{\text{eff}}^4}{n^3} \left(\frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{4n} \right)$$

选择定则 (Dipole Electric Dipole transition)

$$\Delta l = \pm 1.$$

$$\Delta s = 0.$$

$$\Delta m = 0, \pm 1. \quad (\text{Zeeman effect; Paschen-back effect})$$

$$\Delta j = 0, \pm 1. \quad (\text{除 } 0 \rightarrow 0).$$

谱线强度计算.

$$g = 2J + 1.$$

谱线强度 \propto degenerate factor \times 光谱项强度.

$$\text{degenerate factor} = \frac{g(\text{final})}{g(\text{initial})}.$$

Na I D

5890\AA , 5896\AA

D₂ D₁

resonance line.

optical thin $\frac{D_2}{D_1} = \frac{2}{1}$

天体光谱中的 Na I 吸收线

容易见和，两线强度

也会用另一组共振吸收线 $4p \rightarrow 3s$.

O-M L.T. Y Dwarf, $T_{eff} \rightarrow$ infrared.

K I. $4^2S_{1/2} \rightarrow 4^2P_{3/2, 1/2}$.

$7664.91, 7698.97\text{\AA}$.

Rb I $5^2S_{1/2} \rightarrow 5^2P_{3/2, 1/2}$.

$7800.27\text{\AA}, 7947.60\text{\AA}$

sub-dwarf. 晚型星. 弱吸收

Ca II 光谱.

Ca II h & K. $4^2S_{1/2} - 4^2P_{3/2, 1/2}$.

太阳光谱. 晚型星光谱中很强.

J $1/2 \rightarrow 1/2$ $\log g f = -0.201$

J $3/2 \rightarrow 1/2$ $\log g f = 0.106$.

h 线与 He 3920.22 \AA 混在一起.

$\chi_0 = 6.1 \text{ eV}$. DIB (星际弥漫星云) 中一般为 Ca^+ 元 HE.

Ca II triplet

8498.0 \AA 8542.1 \AA & 8662.1 \AA

晚型星云中常有，非饱和，测金属丰度。

$\text{Mg II } h \& k$ 2796 \AA , 2803 \AA . doublet.

容易饱和。

$\text{Mg II } 1240, 1239$.

发射线，星周壳层，电离气体星云。

$\text{C IV } 2s \rightarrow 2p$, 1550 \AA 1548 \AA

quasar, AGN. γ emission line mixed.

行星状星云，发射线

LOS 上的多次吸收。

原子能级寿命

$$\tau = \left(\sum_{j < i} A_{ij} \right)^{-1}$$

电偶极跃迁 $A \sim 10^{28}$ $\tau \sim 10^{-9}$.

$\text{H I } 2s$ 亚稳态。

发射双光子 $A(2s \rightarrow 1s)$ 8.23 s^{-1}

至于 2431 \AA 双光子，光致电离气体星云。 $(\text{H II}, \text{ 行星状星云})$

复杂原子

中心力场模型 (平均场近似?)

$$V_i(r_i) = -\frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{j \neq i} \left\langle \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \right\rangle$$

$$\psi = R_m(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

↓ ↓
与其它 球对称.

电子质量有关.
位置

通过代求解.

$$\psi(r_1, \dots, r_N) = \psi(r_1, \sigma_1) \otimes \psi(r_2, \sigma_2) \otimes \dots \otimes \psi(r_N, \sigma_N).$$

粒子全同性.

$$|\psi(\alpha_1, \alpha_2)|^2 = |\psi(\alpha_2, \alpha_1)|^2.$$

$$\Rightarrow \psi(\alpha_1, \alpha_2) = \pm \psi(\alpha_2, \alpha_1)$$

Pauli Principle.

$$\psi(\alpha_1, \alpha_2) = -\psi(\alpha_2, \alpha_1) \quad \text{Fermion.}$$

双电子原子波函数 可以取

$$\psi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1) \psi_b(2) - \psi_a(2) \psi_b(1)].$$

若 $\psi_a = \psi_b$. $\psi(1, 2) = 0$. \Rightarrow Pauli 不相容原理.

\Rightarrow 高密度 White Dwarf. Neutron Star.

轨道量子效应.

多电子原子

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < \dots$$

轨道量子数.

每一个轨道最多容纳 $2(2l+1)$ 个电子.

		$2n^2$
K	$n=1$	2
L	$n=2$	8
M	$n=3$	18
N	$n=4$	32

$$\text{H: } Ly\alpha 1216\text{\AA} \rightarrow \text{He II } Ly\alpha 304\text{\AA}$$

氦气离子的连续吸收.

单电子激发. 最外壳层的一个电子跃迁到一个高能级.

He 的第一激发态能级高 $1s \xrightarrow{2s} \rightarrow 1s 2s$.
(量子数都变了).

角动量耦合.

$$jj \text{ 耦合. } \hat{j}_i = \hat{l}_i + \hat{s}_i \quad \hat{j} = \sum_i \hat{j}_i$$

LS 耦合.

$$\hat{L} = \sum_i \hat{l}_i$$

$$\hat{S} = \sum_i \hat{s}_i$$

$$\hat{j} = \hat{L} + \hat{S}$$

单双电子

$$\hat{s} = 0, 1$$

$$\textcircled{1} \quad \hat{s} = 0 \quad \hat{j} = \hat{L} \quad \text{单态} \quad \hat{s} = 1 \quad \hat{L} = \hat{j} \quad j = l-1, l, l+1 \quad \text{三态}$$

ex: LmS

O^{III} $1s^2 2s^2 2p^3 d$.

$2p \quad l_1 = 1 \quad s_1 = \frac{1}{2}$.

$3d \quad l_2 = 2 \quad s_2 = \frac{1}{2}$.

$l = 1, 2, 3$.

$s = 0, 1 \quad \cancel{s_1 = \frac{1}{2}} \quad {}^1S_0, {}^1P_1, {}^1D_2, {}^1F_3$

$S = 0$

$j = 1, 2, 3$.

$S = 1$

$j = 0, 1, 2, 3, 4 \quad {}^3P_{0,1,2}, {}^3D_{1,2,3}, {}^3F_{2,3,4}$

ex. jj耦合 (一般是重元素的耦合主导)

也拿O^{III}做例子

$j_1 = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$

$j_2 = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$

$j_1 = \frac{1}{2}, j_2 = \frac{3}{2}$

$j = 1, 2$.

$j_1 = \frac{1}{2}, j_2 = \frac{5}{2}$.

$j = 2, 3$.

$j_1 = \frac{3}{2}, j_2 = \frac{3}{2}$.

$j = 0, 1, 2, 3$.

$j_1 = \frac{3}{2}, j_2 = \frac{5}{2}$.

$j = 1, 2, 3, 4$

忽略相对论效应，相同 $L.S$ 简并，实际上存在微扰不简并

宇称

odd

even.

奇偶性等于 $(-1)^{\sum_i l_i}$

Laporte 定则 dipole transition 只能发生在宇称不同态之间。

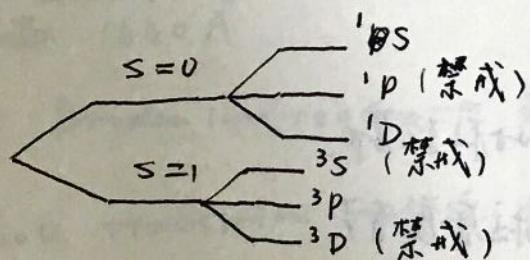
复杂原子的光谱标记

$(2s+1) L^{\left(\begin{smallmatrix} 0 \\ 1 \end{smallmatrix}\right)}$
↓ 总轨道角动量 $S.P.D$

单态、双态...

同核子壳电子， $n.l$ 相同

会有禁戒的光谱项。如 $2p^2$ 只有 $^1S, ^3P, ^1D$ 。



同核

p^1 与 p^5 相同。

p^2 与 p^4 相同... 以此类推...

He I

基态 $1s^2$ 1S

第一激发态 $1^0S, ^3S$
 $1s2s$ 单态 混态。

Hund 规则一.

给定电子组态, S 越大, 能量越低.

三态能量低于单态.

Hund 规则二.

对于给定电子组态和 S , 轨道角动量 L 越大能量越低.

如 $C I, 1s^2 2s^1 2p^2$.

只有两个光谱项 $1S, 1D, 3P$.

$3P$ 是基态 $1D$ 是第一激发态.

Hund 规则三.

S, L 确定排满了越小能量越低.

半满以上了越大能量越低

故 $^3P_{0,1,2}$ 中 3P_0 能量最低

宽于

DIB 原子产生、星际吸收域. 不对称轮廓.

星际弥散吸收带. 与 H, H_2 丰度有关

Diffuse Interstellar Band.

Helium.

25% 重子质量.

$He II$ hydrogen-like. 所有对应波长缩短为 $\frac{1}{4}$.

$\lambda_{Ly\alpha} \approx 304 \text{\AA}$. 高分辨率可以被 FUSE 和 HST 探测到

$\lambda_{He\alpha} \approx 164 \text{\AA}$.

$$\chi_{He} 24.6 \text{ eV} \quad \chi_{HeII} 54.4 \text{ eV}.$$

He II 吸收线通常只在大质量恒星如O中观测到。

He II 发射线多为复合线，高激发光致电离层（中心高能区）。

He I 光谱

两套光谱，单态，三重态

He I 的复合线

Wolf-Rayet Star.

$$2p^3P - 4d^3D \quad 4471.50 \text{ \AA}$$

强星风，宽谱线。

$$2p^3P - 3d^3D \quad 5875.70 \text{ \AA}$$

$$2p^1P - 3d^1D \quad 6678.15 \text{ \AA}$$

$$1s^1S - 2p^1P \quad 584.3 \text{ \AA} \quad \text{resonance line FUV.}$$

He II 复合线

$$HeII\alpha \quad 1640 \text{ \AA}$$

ACN. Broadline region. \rightarrow 光致电离。

Dipole transition rules. for sophisticated atom.

Δn any.

$$\Delta l = \pm 1$$

$$\Delta S = 0$$

$$\Delta j = 0, \pm 1 \quad (0 \rightarrow 0 \text{ 除外})$$

$$\Delta m_j = 0, \pm 1$$

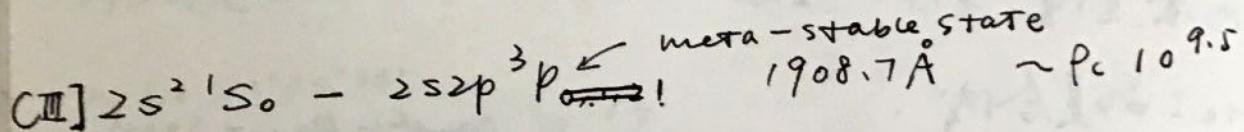
量子数不变。

非严格规则

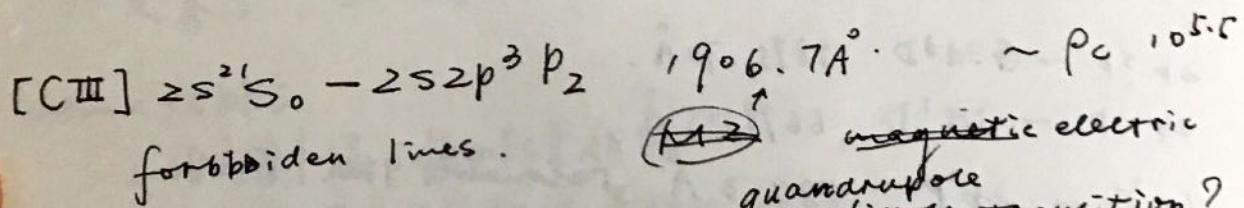
光子一般不改变自旋 $\Delta S = 0$.

相对论效应使不同自旋态混合，使不同自旋态之间跃迁成为可能。

\downarrow
intercombination lines. 交错线



在光致电离气体星云中，AGN 中可以看到。



组态相互作用 Configuration interaction?

Be ground state. $1s^2 2s^2 (95\%) \rightarrow 1s^2 2p^2 (5\%)$.

单重 $\Delta L \neq 0$.

~~ΔL~~

复杂原子

$\Delta L \neq 0$ 等于 0，但 $\Delta L \neq 0$.

Magnetic dipole transition / Electric quadrupole transition

Dipole.

$\Delta J = 0, \pm 1 (0-0x)$

$\Delta M = 0, \pm 1$

极化

$\Delta L = \pm 1$ (单重)

$\Delta S = 0$

~~Z4~~ Z4

$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2 (0-0, \frac{1}{2}-\frac{1}{2}, 0-0)$

$\Delta M = 0, \pm 1, \pm 2$

单重不变

组态不变 $\Delta L = 0, \pm 1, \pm 2 (0-0, 0-1x)$

$\Delta S = 0$

~~M2~~ .

M2

$\Delta J = 0, \pm 1 (0-0x)$

$\Delta M = 0, \pm 1$

单重不变

组态不变 对所有 $\Delta L = 0, \pm 1 = 0$

$\Delta L = 0$

$\Delta S = 0$

禁戒

来自于亚稳态，低密度区域，即无碰撞退激发，又无法由电偶极跃迁，故能寻找其他跃迁形式

类 He I: Mg I.

星系中重要的吸收线 $3s\ 3p^3 P_{0,1,2} - 3s\ 4s\ 3S_1$

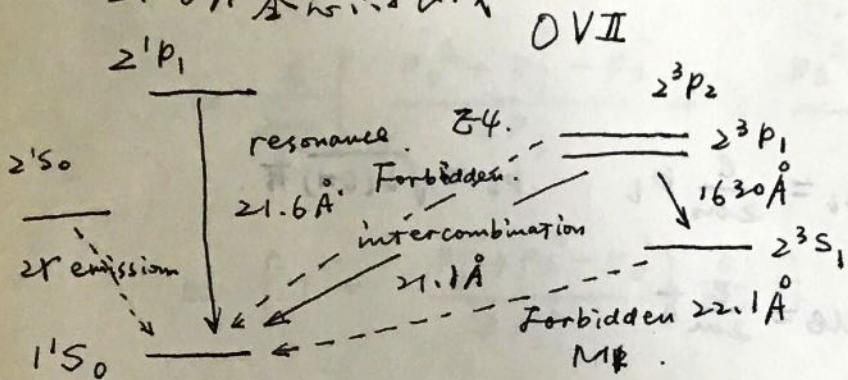
5167 \AA

5173 \AA

5184 \AA

O VII 与 He I 等电子序列。

21.6 \AA 基态共振线



类 He I.

W: $1s\ 2p - 1s^2\ 1P_1 - 1S_0$ resonance.

X: $1s\ 2p - 1s^2\ 3P_2 - 1S_0$ Z4.

Y: $1s\ 2p - 1s^2\ 3P_1 - 1S_0$ intercombination.

Z: $1s\ 2p - 1s^2\ 3S_1 - 1S_0$ M2.

$1s\ 2p - 1s^2\ 3P_0 - 1S_0$ X

Bowen 黄光发射机制

O III $2p^2\ 3P_2 - 3d\ 3P_2$ $\lambda 303.803$ 与 He II Ly α $\lambda 303.783$ 相近。

光致电离星云中大量 Ly α 跃迁激发 O^{III}. O^{III}自发向下跃迁形成多条谱线.

H Ly β 1026 Å 5 OVI

Probing reionization of H / He.

H, He 附近，完全吸收.

磁场中的光谱.

原子磁矩.

$$\text{电子轨道磁矩 } \mu_l = \frac{e}{2m} p_l \quad p_l = \sqrt{l(l+1)} \hbar.$$

$$\text{定域 Bohr 磁矩 } \mu_B = \frac{e}{2m} \hbar$$

$$\Rightarrow \mu = \sqrt{l(l+1)} \mu_B.$$

电子自旋磁矩

$$\mu_s = g_s \frac{e}{2m} p_s \stackrel{g_s \approx 2}{=} \frac{e}{m} p_s \quad p_s = \sqrt{s(s+1)} \hbar.$$

单重电子 $s = \frac{1}{2}$.

$$\mu_s = \sqrt{3} \mu_B.$$

核自旋磁矩.

$$\mu_n = \frac{e}{2M} \hbar \ll \mu_s, \mu_B. \sqrt{J} \text{ 忽略.}$$

原子总磁矩.

单电子原子. $\vec{p}_j = \vec{p}_l + \vec{p}_s$.

注意 \vec{p}_j 与 $\hat{\mu}_B$ 不在同一方向上. 因为存在 $g_s \approx 2$.

总的有效磁矩是 $\hat{\mu}$ 在 \vec{p}_j 方向上的投影.

$$\begin{aligned}\hat{\mu}_j &= \hat{p}_l \cdot \frac{e}{2m} \cos\langle l, j \rangle + \hat{p}_s \frac{e}{m} \cos\langle s, j \rangle \\ &= \frac{e}{2m} \left[\hat{p}_l \cos\langle l, j \rangle + 2\hat{p}_s \cos\langle s, j \rangle \right] \\ &= \frac{e}{2m} \left[\frac{\hat{p}_l^2 + \hat{p}_j^2 - \hat{p}_s^2}{2\hat{p}_j} + 2 \frac{\hat{p}_s^2 + \hat{p}_j^2 - \hat{p}_l^2}{2\hat{p}_j} \right] \\ &= \left[1 + \frac{\hat{p}_j^2 + \hat{p}_s^2 - \hat{p}_l^2}{2\hat{p}_j^2} \right] \frac{e}{2m} \hat{p}_j \\ &= g_L \cdot \frac{e}{2m} \hat{p}_j\end{aligned}$$

g_L : Landé g-factor.

$$g = 1 + \frac{3}{2j(j+1)} + \frac{s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$$

特殊情况.

$$\textcircled{1} \quad s=0 \quad l=j \Rightarrow g_L = 1$$

$$\textcircled{2} \quad l=0 \quad s=j \Rightarrow g_L = 2.$$

$$\mu_s = -g_s \hat{\mu}_B \cdot \hat{p}_s / \hbar \quad \mu_j = -g_j \hat{\mu}_B \cdot \hat{p}_j / \hbar.$$

$$\mu_l = -g_L \hat{\mu}_B \cdot \hat{p}_l / \hbar$$

$$\text{多电子磁矩} \hat{\mu}_J = g_L \frac{e}{2m} \hat{p}_J$$

只考虑 ψ 耦合.

$$g = \frac{3}{2} + \frac{s(s+1) - l(l+1)}{2J(J+1)}$$

外磁场附加能量 (弱磁场微扰) Zeeman effect

$$\Delta E = \hat{\mu}_J \cdot \vec{B}$$

$$= g_L \frac{e}{2m} \hat{p}_J \cdot \vec{B}$$

取 \hat{B} 为 \hat{z} 方向

$$\Delta E = g_L \frac{e}{2m} m_J \hbar \cdot \vec{B}$$

$$= g_L \mu_B m_J B. \quad (\text{分不清大小} B \text{和} \mu_B \text{磁场强度})$$

$$m_J = -J, \dots, 0, \dots, J. \quad (2J+1) \text{ 个.}$$

以 ${}^2P_{3/2}$ 为例, $L=1, S=\frac{1}{2}, J=\frac{3}{2}$.

$$g_L = \frac{4}{3}$$

$$m_J = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$$

$$m_J g_L = -2, -\frac{2}{3}, \frac{2}{3}, 2.$$

$$\text{能级间隔 } \frac{4}{3} \mu_B B.$$

强磁场 (Paschen-Back effect?) 无耦合.

单独考虑 \hat{l}, \hat{s} 在 \hat{z} 方向投影.

$$\mu_S = g_S \mu_B S_z = 2\mu_B S_z \quad S_z = -S, \dots, S.$$

$$\mu_L = g_L \mu_B m_L = \mu_B m_L \quad m_L = -L, \dots, L.$$

$$\Delta E = (\mu_S + \mu_L) B = \mu_B B (m_L + 2S_z).$$

ex: OI $1s^2 2s^2 2p^4$ - \bar{J} 态 3P 在强磁场中.

$$L=1 \quad S=1 \quad m_L = -1, 0, 1 \quad S_z = -1, 0, 1.$$

$$\Delta E = \mu_B B (-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3)$$

强 > 10 T.

Zeeman 效应 大约在精细结构量级.

normal Zeeman effect

$$\text{单态 } S=0 \quad g_L=1$$

$$\Delta E = m_L g_L \mu_B B$$

$$= m_L \mu_B B.$$

$$\text{ex: } {}^1D \text{ 分裂 } S=0 \quad L=2 \quad \Delta E = (\pm 2, \pm 1, 0) \mu_B B.$$

anomalous Zeeman effect.

$$\text{OI } {}^3P_2 \quad L=1 \quad J=2 \quad S=1 \quad g_L = \frac{3}{2}.$$

$$\Delta E = \left(-3, -\frac{3}{2}, 0, \frac{3}{2}, 3 \right) \mu_B B.$$

${}^3P_1 \rightarrow$ 分裂成 3 个能级 ${}^3P_0 \rightarrow 1^-$ 故 3P 在强磁场中分裂成 8 个能级

能级间隙? 取 $B = 10^3$ G.

$$\frac{3}{2} \mu_B B = 8.7 \times 10^{-6} \text{ eV.} \sim 0.07 \text{ cm}^{-1}$$

$$\text{取 } \lambda \approx 5000 \text{\AA} \quad \Delta \lambda = 0.0175 \text{\AA}$$

磁场下的光谱.

$$E_2 \rightarrow E_1$$

$$\text{无磁场 } h\nu = E_2 - E_1.$$

$$\text{有磁场 } h\nu = \Delta E_2 - \Delta E_1$$

$$= (m_2 g_2 - m_1 g_1) \mu_B B.$$

$$\Delta \nu = (m_2 g_2 - m_1 g_1) \frac{\mu_B B}{h}$$

$$= (m_2 g_2 - m_1 g_1) \frac{eB}{4\pi me}$$

Larmor frequency.

$$\Delta \frac{1}{\lambda} = (m_2 g_2 - m_1 g_1) \frac{eB}{4\pi me c}$$

Lorentz unit.

$$= (m_2 g_2 - m_1 g_1) L$$

选择定则

① $\Delta m_J = 0$ ($\Delta J = 0, \Delta m_J \neq 0$). 线偏振 π 极.

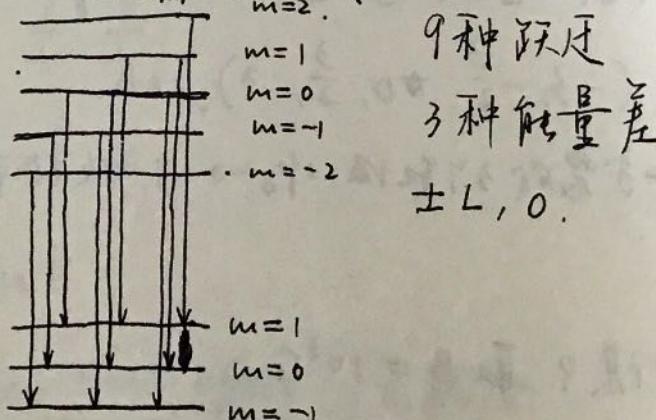
② $\Delta m_J = \pm 1$ 左右旋圆偏振 σ 极

子常 Zeeman effect.

$$^1D_2 \rightarrow ^1P_1$$

$$^1D_2 \quad ^1P_1 \\ S=0, \quad S=0$$

$$L=2=J \quad L=J=1$$



anomalous Zeeman effect

NaI D $^2P_{3/2}, ^2P_{1/2} \rightarrow ^2S_{1/2}$

$^2P_{3/2} \quad s = \frac{1}{2} \quad l = 1 \quad j = \frac{3}{2} \quad g_L = \frac{4}{3}$

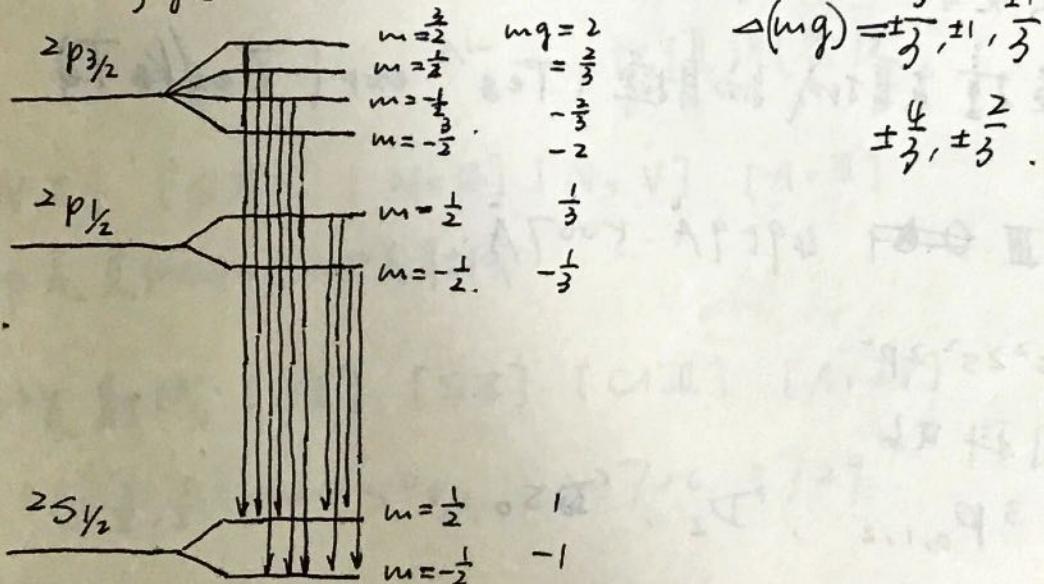
$$m_j g_L = (\pm 2, \pm \frac{2}{3})$$

$^2P_{1/2} \quad s = \frac{1}{2} \quad l = 1 \quad j = \frac{1}{2} \quad g_L = \frac{2}{3}$

$$m_j g_L = \pm \frac{1}{3}$$

$^2S_{1/2} \quad s = \frac{1}{2} \quad l = 0 \quad j = \frac{1}{2} \quad g_L = 2$

$$m_j g_L = \pm 1$$



天体中的强磁场.

白矮星 $\sim 10^6 G \rightarrow$ 大磁距.

Nebular Spectra.

Gaseous Nebulae

H II / diffuse region. 中心. 一个或多个 O/B 型星.

planetary Nebula 中心: 死在死亡的恒星 → 白矮星

特征. 高温. 低密度

碰撞激发概率低 → 禁线. 半禁线.

丰富的发射线

复合过程.

碰撞过程 (禁线). 碰撞激发. 胶沉.

发光机制. 线发光. 连续星光.

碰撞发射线辐射率 ($T_e^{-1/2} \exp(-E_{ex}/k_B T_e)$)

O III: ~~4959 Å~~ 4959 Å. 5007 Å.

$1s^2 2s^2 2p^2$.

同科电子

$^3P_{0,1,2}$, 1D_2 , 1S_0 .

4959, $^1D_2 \rightarrow ^3P_1$

5007 $^1D_2 \rightarrow ^3P_2$

碰撞发射线 → 电子密度, 温度.

上能级相同. $\frac{\lambda 5007}{\lambda 4959}$ 比例只和发射系数有关.

O^{III} 精细结构. 51.8 & 88.4 μm. ${}^3P_2 \rightarrow {}^3P_1, {}^3P_1 \rightarrow {}^3P_0$

发射率对温度敏感 对电子密度敏感.

C^{II} 158 μm. ${}^2P_{3/2} \rightarrow {}^2P_{1/2}$. 在星爆星系中

O^{III} 紫外发射线.

${}^3S \rightarrow {}^3P$ $\lambda 1661, 1666$ 丰繁成

星云消光较大.

[C^{III}] 1907 [O^{III}] 1909. Critical density $n - 13$.

\downarrow
τe 值测密度.

[N^{II}]. [S^{III}]. [Ne^{III}]. [Ne V]. [Ar^{III}].

都是类似的. ${}^2P^2$ 发射线.

${}^2P^3$ 发射线 [O^{II}]. [S^{II}]. [Cl^{III}]. [Ar^{IV}].

${}^2D_{3/2}, {}^5/2 \rightarrow {}^4S^{\circ} 3/2$. 3726. 3729.

O^{III} Bowen 黄光发射线.

来自于 He^{II} Lyα.

resonance scattering.

3700 Å ~ 3800 Å. 多且.

N III 二次 Bowen 荧光发射线.

O III 线 $\approx 374 \text{ \AA}$ 再次被 N III 吸收.

O I 宽光线, $\lambda 8446$.

通过只振线 1025.76 \AA 吸收 $\text{Ly}\beta \lambda \approx 1025.72 \text{ \AA}$.

双电子激发, dielectronic recombination.

如 Ca I, 若外层一个电子处于基态 \Rightarrow 主序列, Main branch.

双电子激发的 $3\alpha_{nl}$.

He I 的双激发能量都高于第一电离能.

\Rightarrow 自电离, 双粒子复合.

(双激发态能量高了第一电离能)

(过程无辐射产生).

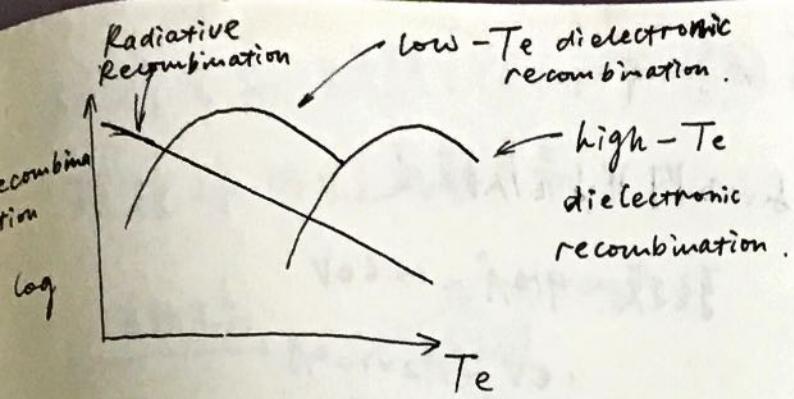
谱线较宽?

共振自电离态的存在在原子光致电离截面中引入一系列共振峰. (这附近的光子易被吸收形成共振自离)

复杂离子, 原子复合过程.

C II $\lambda 1335 \text{ \AA}$, 双电子复合谱线 $2s^2 p^2 {}^2D \rightarrow 2s^2 2p^2 p$.

双电子复合与跃迁路径直接复合不同.



重离子复合.

O^{II} $\lambda 4267 \text{ \AA}$

O^{II} 复合线: 3s, 3p, 3d, 4f 支点.

O^{II} 大多处于 3p

↓ 停获电子 O^{II}

ex: 3p + 4f (²F).

$\Rightarrow l = 2, 3, 4$.

$s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$.

²D ²F ²G.

4D ⁴F ⁴G.

一共有 8 个能级 \Rightarrow 互相跃迁出一大堆乱七八糟的线

相对强度来自于统计权重. $g = (2s+1)(2l+1)$.

X射线光谱.

高度电离重原子的内电子层跃迁.

$0.01\text{\AA} \sim 100\text{\AA}$ 红移 $912\text{\AA} \sim 13.6\text{eV}$

1 keV

$1\text{eV} \sim 1.2 \times 10^4\text{\AA}$
 $1\text{keV} \sim 12\text{\AA}$.

SXR. $1 \sim 100\text{\AA}$ $0.1\text{keV} \sim 10\text{keV}$.

HXR. $0.01 \sim 1\text{\AA}$ $10\text{keV} \sim 1\text{MeV}$

γ ray 来自放射核过程.

ROAST. XMM-Newton. Chandra.

X射线源:

河内X-射线双星. 伴星为致密天体(黑洞, 中子星).

主星为普通恒星.

致密天体吸积、主星物质产生X射线.

河外源: AGN / Quasar

Chandra
 $0.1 \sim 10\text{keV}$ SXR. Resolution $\sim 1\text{arcsec}$.

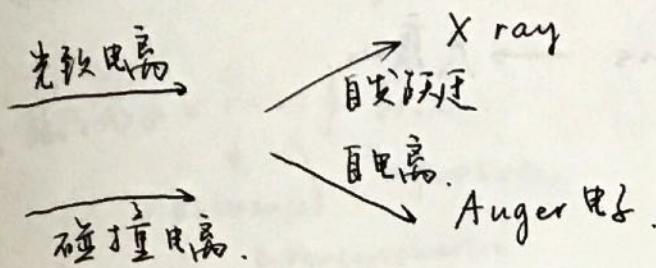
XMM-Newton.

$0.1 \sim 12\text{keV}$. 多波段成像.

高次电离离子跃迁. Fe XXVI Ly α . 7.013keV . 1.768\AA

荧光激发(光致电离). 高能X射线使内壳层电子电离.

碰撞电离：炽热 ($T_e \sim 10^7 - 10^8 K$) 等离子体中高能电子
碰撞将内电子电离。



轻元素发射 Auger 电子能量较大。

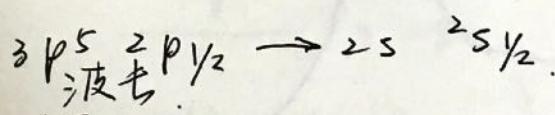
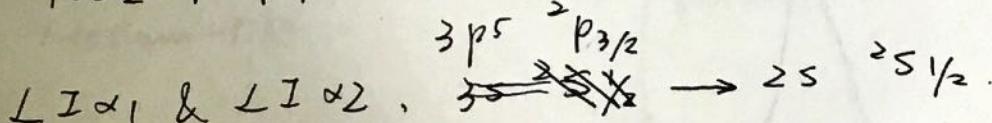
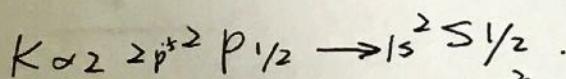
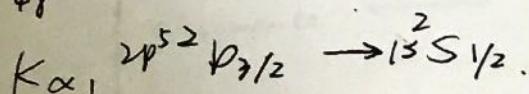
K 壳层跃迁到 $n=1$ 的发射线 $\Delta L = \pm 1, \Delta J = 0, \pm 1$
($O \rightarrow O$ 轱成)

L --

M --

K壳层有空穴，L壳层电子向下填充 $\Rightarrow K\alpha$ 轼成
(光谱图上都标拿掉一个电子能级)。

以 ${}_{48}^{48}Cs$ $5s^2$ 为例。



Fe 不同电离态 $K\alpha$ 轼成非常接近 $\sim 1.93 \text{ \AA}$

电离度减少而长波移动。

中性 Fe 之波长反而比一部分高次电离 Fe $K\alpha$ 线短。

AGN 放射宽，Fe发射线 → 库页谱。

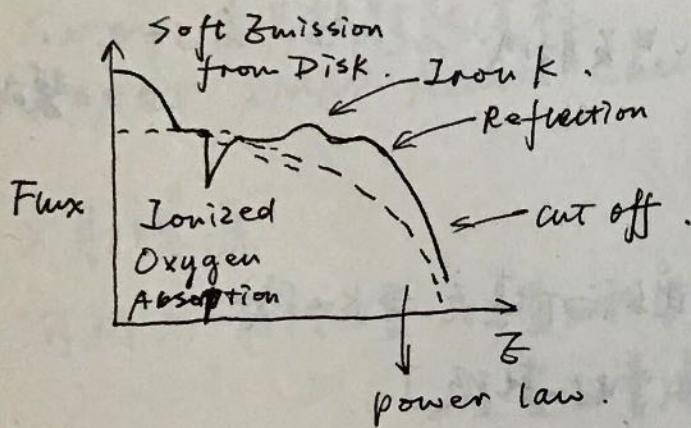
天鹅座 X-1.

X 射线光变时标，几十 ms → 尺度小。

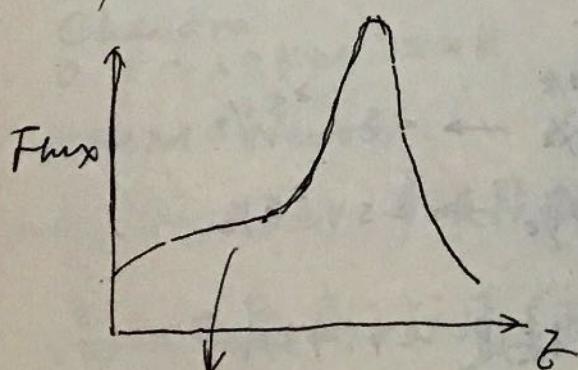
伴星 $\sim 15 M_{\odot}$

→ 伴星

AGN. X 射线最中心位置



Broad K α . in BH.



Doppler shift &
gravitational red shift.

类氢粒子 X 射成. ($\text{Ly}\alpha$, $\text{Ly}\beta$).

OVIII, NeX, MgXII, SiXIV.

类氢离子 - r.i.f 跃迁
↓
resonance } → forbidden
intercombination

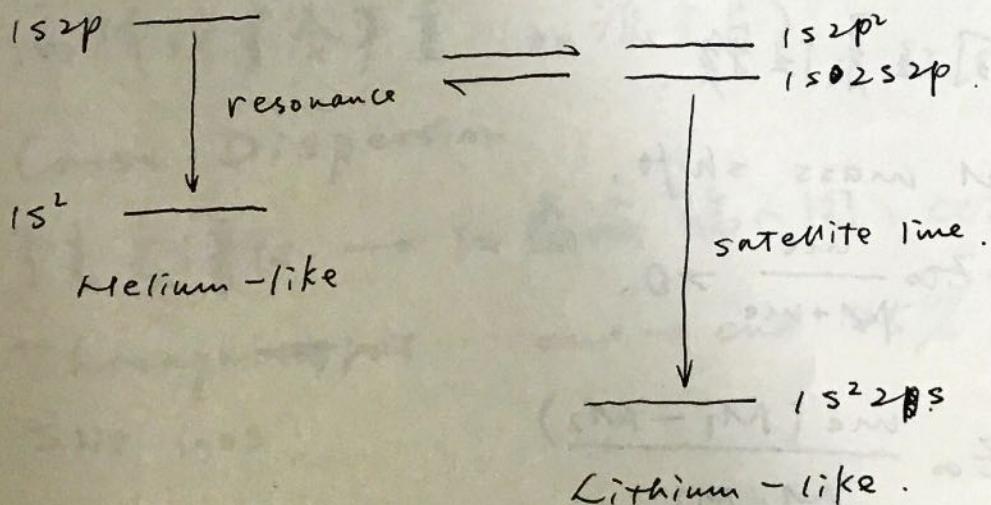
OVII.

卫星线 satellite lines

C, N, O, Fe 高度电离, 双电子复合成. 尤其是类氢成.

类 H 原子辐射系 $1s\text{nl} \leftarrow 2p\text{nl}$.

类 He 原子辐射系 $1s^2\text{nl} \leftarrow 1s2p\text{nl}$.



辐射强度可用于测量电子温度

Smith et al 2001. OVII $G = (F + I)/R$.

Chandra 低色散光谱.

大量重元素类 H, He.

Seyfert-2 galaxy. / Type -2 AGN.

Markarian Catalog.

无亮线区.

日冕红线 Fe X 6374 Å.

④ green line · Fe XIV 5302 Å

yellow line Ca XV 5694 Å.

PAH. 吸收 (参见芳香烃). 红外.

↑
A_αN 光谱

多电子同位素迁移.

normal mass shift.

$$\delta Z = -Z_\infty \frac{m_e}{M + m_e} > 0.$$

$$\Delta Z \approx Z_\infty \frac{m_e (M_1 - M_2)}{M_1 M_2}.$$

光谱仪和光谱观测.

Grating.

Prism.

Concave grating on a prism. (~~透射光栅~~)?

Long-slit / multi-slit

Multi-fiber.

Blazed Grating.

长缝光谱仪

resolution $\propto \lambda$.

Resolve power $R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}$.

分辨率高 \rightarrow 信噪比低

高阶项重合严重. (加透光片).

Cross Dispersion.

窄光光谱仪 \rightarrow T₂ 蓝两端不同; CCD.

Throughput. end \rightarrow end 45%.

Slit Loss

On-chip binning. 多个 pixel 合成一个 pixel.
提高信噪比.

~~大视场~~

远离天顶 \rightarrow 大气成为接收分光.

Solution.

1) slit along the dispersion.

2) ADC. Atmospheric Dispersion Corrector.

Multiobject Spectroscopy.

Multislit. (不同 slit 光谱花图不一样).
↓

两块 CCD.

Slit conflict (~~两~~平行光谱).

High throughput output.

Choose slit width & length.

Good sky subtraction.

multi fiber system.

large fields.

uniform wavelength

Efficient use of detector data.

多因子原子、同位素位移.

飞常.

飞常质量位移: $\Delta \sigma = \frac{m_e (M_1 - M_2)}{M_1 M_2}$ 质量大. 蓝端.

体积同位素效应. (原子核形状. 电荷分布带来的影响)

核自旋: Hyper-fine Structure.

$$\hat{F} = \hat{I} + \hat{J}$$

${}^1\text{HI}$ ground state $2S_{\frac{1}{2}}$ $J = \frac{1}{2}$ $I = \frac{1}{2} \Rightarrow F' = 1$ $F = 0$

$\Rightarrow 21\text{ cm}$ 普通.

Integral Field Units. (IFU).

积分视场光谱仪.

$I(x, y, \lambda)$ 获取整个星系的信息. 多星系积分光谱.

Lenslets. / Lenslets & Fibres / Image Slicer.

Mg II b?

Slitless Spectroscopy. (prism).

wide-field surveys. only for bright source.

Spectroscopy Observing.

Flat field correction.

flux standard (calibration)

wavelength calibration.

if no ADC.

→ 基本电路原理
Bias and overscan correction.

Flat-fielding → 有一部分 CCD 没有被照射到
(现在尚可直接用 over
OS exposure time. scan 当 bias 消掉).

flat-field. CCD pixels response varies with wave
dark current 长时间曝光的电流. 随时间上升
近红外明显.

SAD Image ds9.

poly fit. then normalized.

Two major problems.

1. fringing (in the red) interference
(光干涉)

2. Slit width / illumination pattern.

¶

Science image.

$\Sigma D \rightarrow 1D$.

determine the extraction band.

Sky subtraction.

(每一个 pixel 对应扣除 sky).

Wavelength calibration.

use lamp-line to derive function.

Flux calibration.

用标准星定标. 早型星 A0.

掩星. 速度. 速度

→ 外行星.

直接观测宇宙膨胀. $z=1 \Delta z / \text{for } 10 \text{ yrs} \sim 10^{-10} \dots$

SDSS. 大规模多色巡天.

drift scan mode.

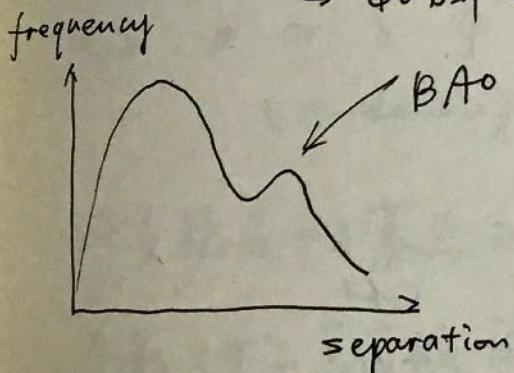
DZSI Dark Energy Spectroscopic Instrument.

Subaru PFS Project

BAO. (光子和重子一起传播 40 万千米)

→ 40 万千米后脱耦. 重子留在原地

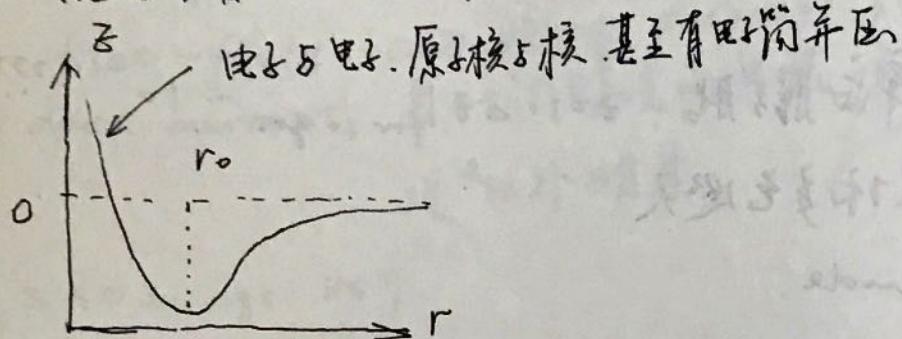
BAO peak. (测不同红移特征尺度).



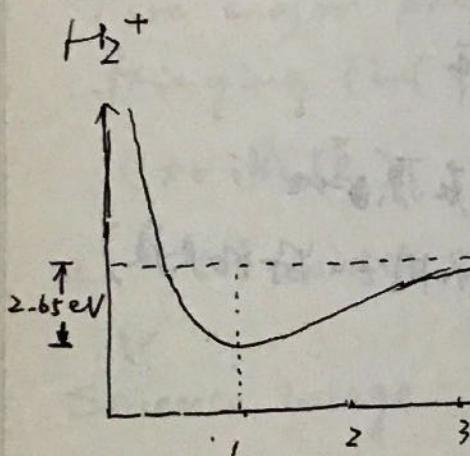
分子光谱 Molecular Spectrum.

河外. 高红移基本不用考虑信号太弱了.

离子键 $V = -\frac{Z_1 Z_2}{r}$



共价键. H_2 . N_2 . H_2^+



行星大元.

H_2

CH

彗星.

CO

Carbon

CN

Monoxide

OH

冷星. 星.

分子的形成:

星际气体云.

需要尘埃颗粒作为媒介.

主要是河内.

转动和振动.

Born - Oppenheimer 近似

电子和原子核运动完全分离考虑.

④ 带状运动 \rightarrow 振动 \rightarrow 转动.

\downarrow
紫外、可见光 红外

亚毫米、甚至射电

bounding & anti-bounding.

电子轨道角动量 (LS 耦合).

在轴、方向上是常数. $\rightarrow M_L$.

投影

$$l = |M_L|$$

$$l = 0, 1, 2, 3$$

$$\sum \pi \Delta \Psi$$

简并度 1 2 2 2.

电子 σ π δ ϕ

(1-double)

许多稳定分子基态为 $^1\Sigma$ (双电子分子)

$$\left\{ \begin{array}{l} \Sigma^+ \text{ 对某轴平行} \\ \Sigma^- \text{ 反之} \end{array} \right.$$

奇数个电子总自旋角动量为 $\frac{1}{2}$. $\Leftrightarrow H_2^+, CN$ 基态为 $^3\Sigma$

CH, OH, NO 基态 $^2\Pi$

同核双原子分子. 波函数对称 (gerade) 或反对称 (ungerade). (来自于全同性).

几乎所有 Σ 态是 Σ^+ . O_2 基态为 $\text{X}^+ \Sigma_g^-$

同核分子的电子态标记.

如 Σ_g^+ 等不是唯一的.

X 表示基态.

A, B, C 与基态相同自旋多重性激发态.

a, b, c, ... 不同

H_2 分子: 电离 15.422 eV, 离解 4. eV

对于给定的 S 和 L , 电子态能量表示为

$$T = T_0 + A \Lambda M_S$$

用 $\Lambda + M_S$ 标记更普遍

$$\geq S+1 \Lambda_{\Lambda+M_S}$$

$$\Omega = |\Lambda + M_S|$$

由于 A 可正可负, $A > 0$ regular, $A < 0$ inverted.

Munro 情形 a) $\Lambda = |M_L|$

$$\Omega = |\Lambda + M_S|$$

$$J = 0 + \Omega$$

↓
核自旋角动量.

b) 自旋最后耦合. 先把核 O 和 n 耦合.

还可以再和核自旋 J 耦合. $F = J + I$.

12 原子分子 Schrödinger 方程.

$$(H - Z) \psi(r_A, r_B, r_z) = 0.$$

$$H = T_N + T_e + V_{NN} + V_{ee} + V_{eN}.$$

假设核固定, 两者分离. $H_{ei} = T_{ee} + V_{NN} + V_{ee} + V_{eN}$

$$\psi = \phi_e(\vec{r}_i, \vec{R}) \chi_N(\vec{R}_A, \vec{R}_B)$$

$$(H_{ei} - Z_e) \phi_e(\vec{r}_i) = 0.$$

bounding & antibounding.

核波函数

$$[T_{NN} - V(R) - Z] \chi_N(R_A, R_B) = 0.$$

$$\chi_N = \chi_v \chi_r. \text{ 振动与转动.}$$

$$Z_r = \frac{\hbar^2}{2I_0} J(J+1) = B_0 J(J+1).$$

$$I_0 = \mu R_0^2$$

无转动零上能.

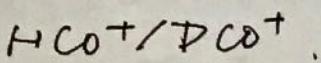
径向, 振动, \rightarrow 近似为简谐振子.

$$E = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

\hookrightarrow 零上能.

转动能 \ll 振动能.

HD、零点能比 H₂ 低很多 → 促进转化。
分馏
H₂ / D₂.



¹³C 和 ¹²C 也有但不明显。

振动能级数目：势阱深度、曲率、原子质量。

Morse 势。

$$\tilde{\nu} = \hbar \omega_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) - \hbar \omega_e \chi_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2.$$

$$D_0 = D_e - ZPE.$$

分子跃迁：

驰豫运动跃迁、微波、射电。

振动跃迁。

旋转运动。

电偶极情况。(同核分子产生不了永远的电偶极)

$$\Delta J = \pm 1$$

$$\Delta E = B_0 [J'(J'+1) - J''(J''+1)]$$

$$= 2B_0 J'$$

$A \propto |J'|^2$. 故电偶极距越大，强度电偶极大。

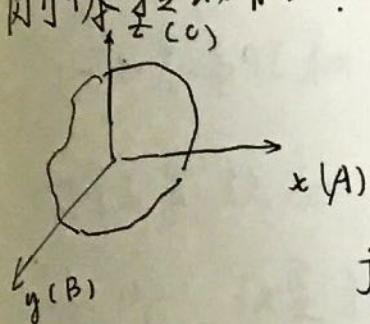
就算是 NaCl 也会被探测到。

非常规则光滑，间隙为 $2B_0$ 。

$$\begin{array}{ccccccc} & 1 & - & 0 & 2 & -1 & 3 & -2 \\ & \hline & 1 & & 1 & & 1 & \\ & 2B_0 & & 4B_0 & & 6B_0 & \end{array} \quad \cdots$$

实际上由于离心力，转动惯量变大， $B_0 \downarrow$ ，谱线间距变小。

刚体转动能。



$$E = \frac{\hat{J}_x^2}{2I_{xx}} + \frac{\hat{J}_y^2}{2I_{yy}} + \frac{\hat{J}_z^2}{2I_{zz}}$$

$$\hat{J}_x^2 = \hbar^2 J_x (J_x + 1)$$

$$\hat{J}_y^2 = \hbar^2 J_y (J_y + 1)$$

$$\hat{J}_z^2 = \hbar^2 J_z (J_z + 1)$$

1) 线性结构，所有双原子。CO₂, HCN.

$$I_{xx} = 0, I_{yy} = I_{zz}$$

$$E_r = \frac{\hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2}{2I_{yy}} = \frac{\hat{J}^2}{2I} = BJ(J+1).$$

2) 球叶称 CH₄, C₆₀

$$I_{xx} = I_{yy} = I_{zz}.$$

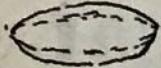
3) 一般叶称 prolate $I_{xx} = I_{yy} > I_{zz}$.

oblate $I_{xx} = I_{yy} < I_{zz}$ (巨行星)

 prolate correction. $C > B$. ($I_C < I_B$).

$$E_r = B J(J+1) + (C-B) K^2.$$

K 为 J 在 C 轴上的投影. 能级随 $K \uparrow$ 而 \uparrow

 oblate correction. $C < B$ ($I_C > I_B$).

$$E_r = B J(J+1) + (C-B) K^2. ?$$

能级随 $K \uparrow$ 而 \downarrow .

\pm 角动量 等同动量 - 平方.

$$\hbar^2 J(J+1).$$

\pm 动量. $K = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm J$.

圆及 \pm 动量 $M = 0, \pm 1, \dots, \pm J$

分量.

\pm 角动量 转动的跃迁规则.

$\Delta J = 0, \pm 1, \Delta K = 0, J = 0 \rightarrow J = 0$ 禁戒.

1) 对称. 若对称. 无偶极跃迁.

2) 反称对称. 无偶极.

3) 一般对称. 某些轴有偶极. 有例外 H_3^+ .

CO 离子键 $D_0 = 11 \text{ eV}$.

$J - J''$	$\lambda (\text{nm})$
$1 - 0$	2.60
$2 - 1$	1.30
$3 - 2$	0.87.

估算分子密度

$$n(\text{CO}) \approx 10^{-4} n(\text{H}_2).$$

1-0 容易饱和，可以用更高级跃迁。

用位系效应

$^{12}\text{C}, ^{13}\text{C}$. 改变转动惯量 $I = \mu R^2$
 \Rightarrow 光谱距离改变。

CO 的永久偶极距很小，对电偶极跃迁 Einstein 系数 σ 很小。

其他分子的转动光谱

大部分通过观测射电转动光谱认识分子 $J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$

OH 转动光谱 Hund case (a) $J = 0 + \frac{1}{2}$.

CH 转动光谱 Hund case (b) $N \rightarrow 0, 1, 2, 3, 4 \dots \frac{J}{N} = 1$

CS. infar region 吸收，而阶光谱不吸收。

$$I = \frac{1}{2} (\text{hyperfine})$$

$$\frac{J}{N} = 1, 2, 3, 4 \dots \frac{J}{N} = N + S$$

H₂ 同核分子，无偶极辐射。

由电四极辐射。

$$\Delta J = \pm 2.$$

主要在中和近处。

J+1 → J 旋转运动发射成

$$A_{J+1, J} = \frac{64\pi^4}{3h} \frac{(J+1)}{2J+3} \frac{\tilde{D}^3 \mu^2}{\text{cm}^{-1}}$$

$$J \text{ 较大时 } A_{J+1, J} \propto (J+1)^3$$

LTZ下。

$$\frac{N_J}{N} = \frac{2J+1}{U} \exp\left[-\frac{hcB(J+1)}{k_B T}\right]$$

$$U = \sum_{J=0}^{\infty} (2J+1) \exp\left[-\frac{hcB(J+1)}{k_B T}\right] \approx \frac{k_B T}{hcB} \quad (k_B T \gg hcB)$$

光薄情况下：

$$I_{J+1, J} \propto h\nu A_{J+1, J} \frac{N_{J+1}}{(J+2)}$$

$$\propto (J+1)^5 \exp\left[-\frac{hcB(J+1)}{k_B T}\right]$$

辐射最强和产生的最多可能不是二能级。

LTZ吸收 ...

温度效应.

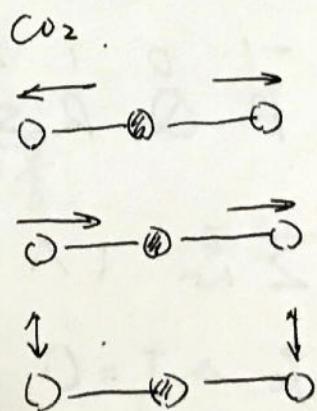
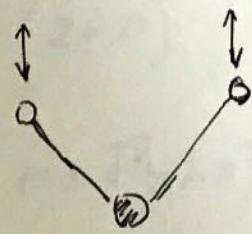
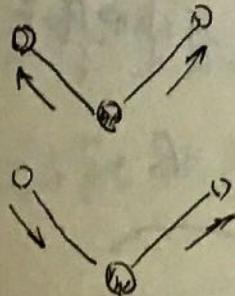
$$\frac{P_T}{P_0} = \frac{g_T}{g_0} \exp\left(-\frac{E_T}{k_B T}\right)$$

由于 E_T 较小，即使在很高、能级上也有~~太多~~很多分子。
低密度下非 LTE ，转动能级分布并未

振动跃迁

一个分子有多少原子，自由度？ $3n - 6$ ；自由度
 $3n - 6$ ；自由度

以 H_2O 为例



简谐振子 束缚极 $\Delta V = \pm 1$.

非简谐 $\Delta V = \pm 1$ 最强.

$\rightarrow \sum$ 电子、转动 (叠加在振动上) $\Delta J = \pm 1$.

振动转动能级

$$\Delta E = E_{\text{pr}}^{\pm 1} - E_{\text{vr}}$$

$$= h\nu + BJ'(J'+1) - BJ(J+1).$$

R 支 P 支.

$$\Delta E = J' = J+1 \quad \text{or} \quad J' = J-1$$

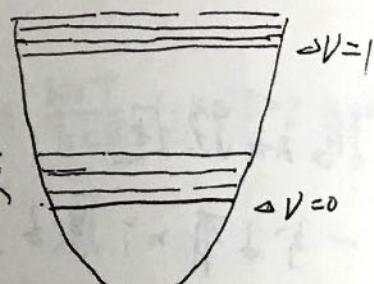
$$\Delta E = h\nu + 2B(J'+1) \quad J' = 0, 1, 2, 3$$

$$\Delta E = h\nu \neq 2BJ' \quad J'' = 1, 2, 3$$

由于这里 $\Delta J = 0$ 是禁戒的. 只有 P.
(\sum 电子)

$P(3)$	$P(2)$	$P(1)$	$R(0)$	$R(1)$
$2-3$	$1-2$	$0-1$	$1-0$	$2-1$
\downarrow	\downarrow	\downarrow	\downarrow	\downarrow
$\hbar\omega$	$2B_0$	$4B_0$		

直线振动.



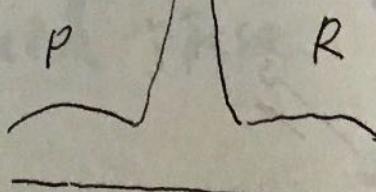
$$\begin{array}{ccccc} -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ O & P & Q & R & S \end{array}$$

可能的分支

因而展览.

非 \sum 态 ($\Lambda > 0$).

存在 $\Delta J = 0$ Q 支.



温度较高 \rightarrow 星际介质，行星大气发射谱。

温度较低 \rightarrow 得冷行星大气，矮行星，吸收成。

同位素效应。

振动基态变化。

重，基态而质子等移动。

转动间距变化。

重，~~能级差~~ \Rightarrow 转吸间距变小。

H₂ (电四极跃迁)

赤道极

$$\Delta J = \pm 2.$$

$$\begin{array}{ccccc} -2 & & +2 & \nearrow & \\ 0 & Q & S & O(J'') & Q(J'') & S(J') \end{array}$$

$$S(0) (3-1)$$

$$S(0) (2-0)$$

并合星系。H₂ 振动能转动谱。

电子能级分布

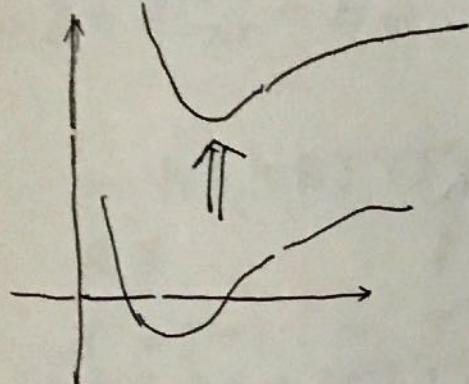
分子电子能级.

电 子能级往复而子离解能.

非热激发. 碰撞. 磁场.

行星冕. 液星.

势能曲线波变



$$\Delta S = 0$$

$$\Delta \Lambda = 0, \pm 1$$

$g \leftrightarrow u$ ($g \leftrightarrow g, u \leftrightarrow u$ 禁戒).

Σ 态 $+ \leftrightarrow +$ 允许.

H₂ 的主要电子跃迁带.

Werner (1008 Å) C' $\pi_u - X' \Sigma_g^+$

Cyanan (1108 Å) $\beta' \Sigma_u^+ - X' \Sigma_g^+$

振动能.

Frank-Condon

振动跃迁.

$$\Delta E = T_e + E'_{\nu r} - E''_{\nu r}$$

$$= h\nu_0 + B'J'(J'+1) - BJ(J+1)$$

P 支 $J' = J - 1$

$$= h\nu_0 - (B' + B)J + (B' - B)J^2$$

Q 支 $J' = J$

$$= h\nu_0 + (B' - B)J + (B' - B)J^2$$

R 支 $J' = J + 1$

$$= h\nu_0 + (B' + B)J + (B' - B)J^2$$

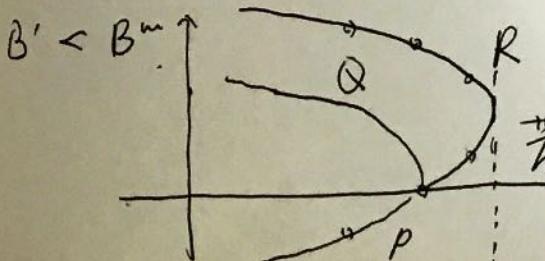
P, Q, R.

$$R = 1, 2, \dots$$

$$P = -1, -2, \dots$$

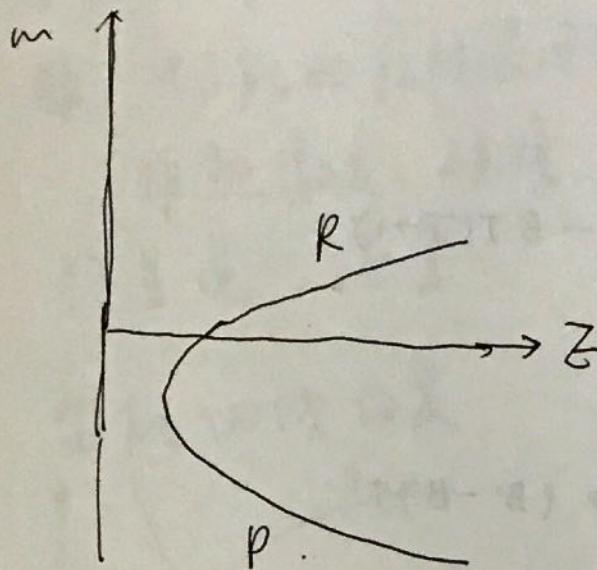
$$\nu = \nu_0 + (B' + B)m + (B' - B)m^2$$

Q
 $\nu = \nu_0 + (B' - B)J + (B' - B)J^2$



节点蓝带. (取后 P, R 交叉差).

$B' > B$. 带头在江深 (开口向高处)

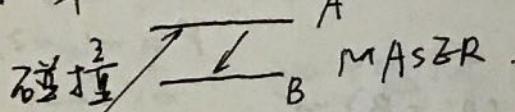


温度效应.

由于振动能级比转动量级高很多.

大多数粒子在低温下处于基态.

脉泽发射 MASER 发射. (转动、振动).



基态