

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 ~~scale~~ 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.

$\sim 5800 \text{ K}$

LTZ. Black body radiation.

大气水在红外波段的吸收.

短波散射强.

atmospheric ~~with~~ 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 类星体

连续谱 + 一系列发射线.

↓

power law.

↓

optical thick Accretion Disk.

不同温度幂律谱的叠加. 最高能到 SXR.

Gamma Ray / HXR Inverse. ~~Compton~~ Compton Scattering
(charged particle $\xrightarrow{\text{energy}}$ photon)

Broadened Line Region.

依旧被黑洞引力束缚 emission line

(线宽大) \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: 遮蔽黑体热辐射. (Obscuring Torus).

Jets. ~~Syaro~~ Synchrotron ~~Emission~~ Radiation.

吸收线: 星际介质 (成双成对).

自吸收: Broad Absorption.

C IV. Lyman α

Blue wing.

Spectral Line.

molecules

Which Atom/Ion/molecule?

Transition from which two states?

(physical environment: T, ρ , L.

Weight / Abundance / Doppler Effect

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

Crotian 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.

\downarrow
误差. 自行. 变源(变星. Supernova. Gamma burst)

分光. 天体在空间中的性质. ...

大气透明度. 宁静度. 星光背景. 稳定性.

自适应光学

无缝光谱: prism.

全部记录.

分辨率低. 星光背景高. 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.

氢原子的量子力学描述.

Wave Function

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

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

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

energy $E = h\nu = \hbar\omega$.

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:

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

$$\text{能量} \cdot E_n = - \frac{me^4}{2n^2 \hbar^2}$$

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

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

s p d f --

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

轨道角动量 $\sqrt{l(l+1)} \hbar$.

光学、紫外 Å

红外 μm	J band	K band	L band	M band
	1.2	1.55-1.6	2.2	

波数 cm^{-1}

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

射电

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

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

高能. eV. keV.

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

$$1 \text{ cm}^{-1} \sim 1.4388 \text{ K}.$$

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

大气折射率. 真空和大气波长.

Doppler 位移.

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

分辨率本领 $R = \frac{\lambda}{\Delta \lambda}$ $R = 3 \times 10^4 \sim 10^5 \text{ km/s}$.

$$T(n) = R_H / n^2.$$

$$\bar{\nu} (n_2 \rightarrow n_1) = T_{n_1} - T_{n_2}.$$

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

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. $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \epsilon$.

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 Å

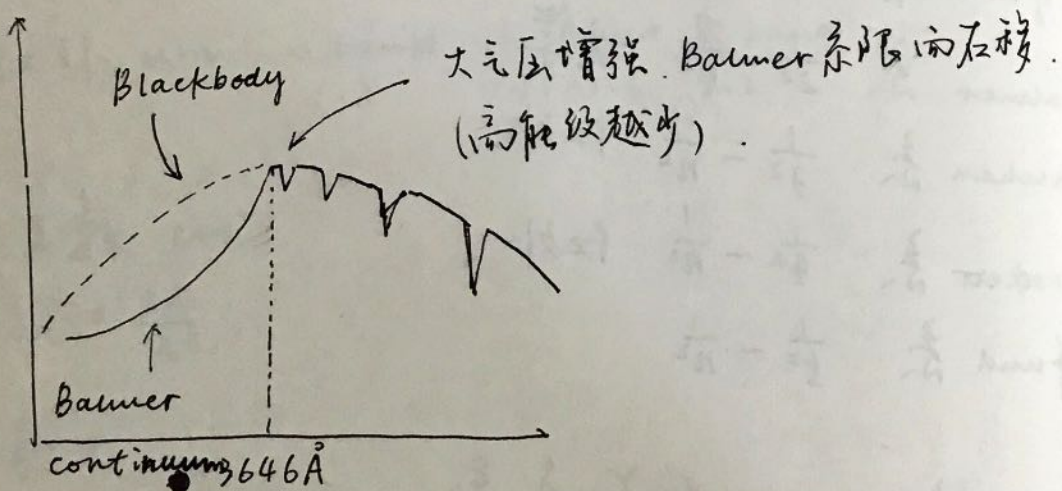
$H\beta$ 4861 Å

$H\gamma$ 4340 Å

Limit ~~at~~ 3646 Å

氢原子谱线. A₀星达到最大

Balmer 连续谱与 Balmer 跃变.



星系中的 Balmer 线

Initial ~~mass~~ mass function. \sim power law -2.35.

星系形成初期, 光谱主要由 O, A 型星决定. 伴有非常强的发射线 (氢 II)

随着 O, A 型星的死亡, 高能光子 ($E > 13.6$ eV) 更少.

Balmer jump 变强.
 最后只剩下一些小质量恒星.

Blue galaxy
 ↓
 red galaxy.

3727
 OII; OIII & Hβ; Hα;
 Mg; Na.

发射线 & 吸收线共存.

Hα & Hβ 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;

OII 3727 double; FIR

(尘埃消光)

(尘埃再辐射)

AGN 反响映射实验 (reverberation mapping).

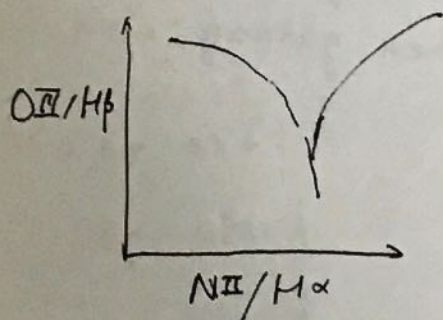
$$M_{BH} = \frac{f R \Delta V^2}{G}$$

→ FWHM
 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.

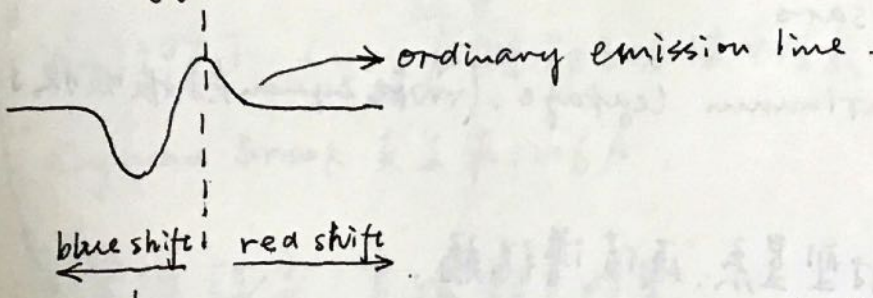
IUE / HST 可以观测到 Ly α . 但无法观测到更高的 Lyman 谱线

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

星际介质的基态氢 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.

AGN. 电离氢区. 宽线区. Lyman 发射线很宽, 与其他线相互重叠.

Lyman 系 jump 不明显. (Ly δ 及以上几乎看不见).

贫金属星系与光谱.

星际介质的 Lyman 线吸收. 不同红移 λ 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.

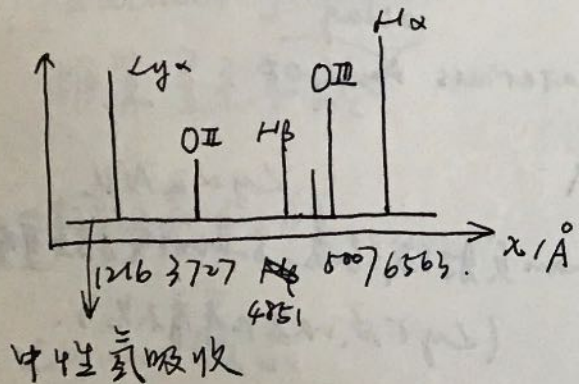
星系光谱中的 Lyman 线.

高红移 Lyman 线 \rightarrow Optical.

可以从地面观测.

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

① LAEs. 发射型星系. 连续谱很弱.



star forming galaxy
高红移星系
研究对象

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

MgII & CIV.

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

How to find high- z galaxies.
Drop out technique LBA's. \rightarrow 通过 Ly α 滤光器估计 ^{进行}

Narrow-band ~~to~~ technique LBA's

高 z 移下, Ly α ~~左端~~ ^{蓝端} 都已经被中性氢吸收.

Lyman Break 发生在 1216 Å.

窄波段亮, 宽波段不明显.

\downarrow
发射线. 估计 z 移.

高激发态谱线 \rightarrow AGN emitter?

Lyman continuum emission.

低能量光子 Lyman limit \rightarrow 光子几乎逃不出来.

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

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

观测上始终是 0 结果.

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

红外星系.

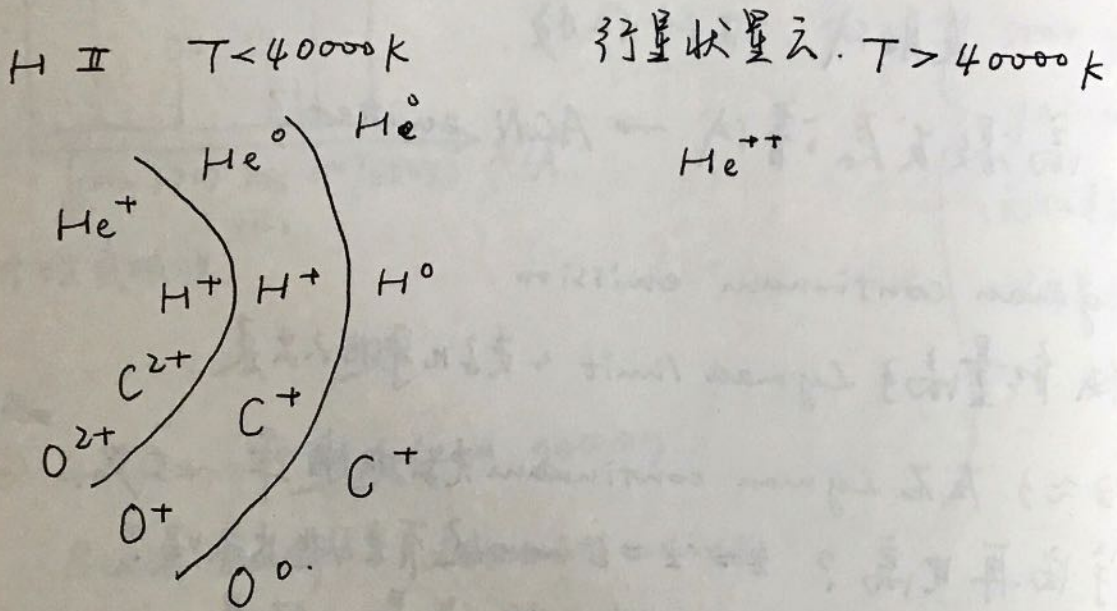
Paschen...

Super Nova. 低密度, 高温, 电离.

复合与复合成. 电离H II

电离H + 自由电子 \rightarrow 束缚态 \rightarrow 自发向下跃迁
 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)



电离氢区

恒星表面的.

极度稀薄 \rightarrow 来自电离源 - 炽热辐射. 能量密度. 有效温

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. 与氢电离碰撞可忽略.

除 Balmer 连续谱与发射线外, 还有重原子的禁线.

射电复合线.

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)

电离氢区最高观测到 $n=300$.

H166 α 落在 21 cm 谱线旁边.

射电波段 \sim Rayleigh-Jeans' ~~tail~~ tail.

\Rightarrow Black Body \sim Temperature.

He ¹¹⁴ α 线宽大于 C ¹¹⁴ α 线宽, 原因在于 H, He, C 来自不同区域. He 电离电势较高, 故所在区域压力效应明显.

原子角动量.

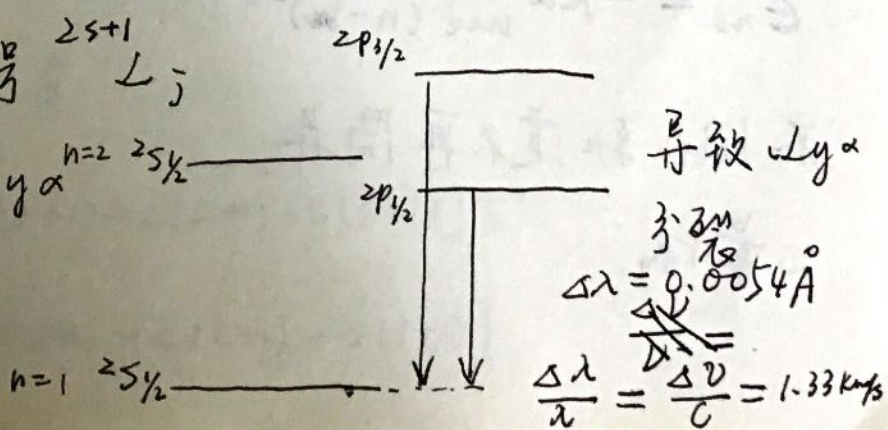
l, s, j .

Fine Structure.

Couple of l, s & Relativistic effect.

光谱能级记号 $2s+1 L_j$

HI $n=2$, $Ly\alpha$ $n=2$ $2s_{1/2}$



Hyper-Fine structure. ⊕

$1s^2 S_{1/2} \quad f=0$ 或 $1.$

21cm. 1.4GHz 几乎光子薄. 纵向速度 profile FWHM
强度给出中性 H
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 AlII, SiIV.

K-like CaII.

C, O, Mg, Ca. α -elements.

formed by nuclear fusion of He

Old/red galaxy no emission line.

broad emission line - AGN.

$$E_{nl} = -R_{\infty} \frac{\mu}{m_e} \frac{1}{(n - \delta_{nl})^2}$$

不同轨道不再简并.

S最低.

Na spectrum series.

principle series.

$$n^2 P_{3/2, 1/2} \rightarrow 3^2 S_{1/2}, \text{ double lines}$$

sharp series.

$$n^2 S_{1/2} \rightarrow 3^2 P_{3/2, 1/2}, \text{ double lines.}$$

diffusive series.

$$n^2 D_{5/2, 3/2} \rightarrow 3^2 P_{3/2, 1/2}, \text{ triplet lines.}$$

fundamental series.

$$n^2 F_{7/2, 5/2} \rightarrow 3^1 D_{5/2, 3/2}, \text{ triplet lines.}$$

Correction.

Li

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

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

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

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2me} \quad \hat{U}_s = -g \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{S}$$

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

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

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

NaI.

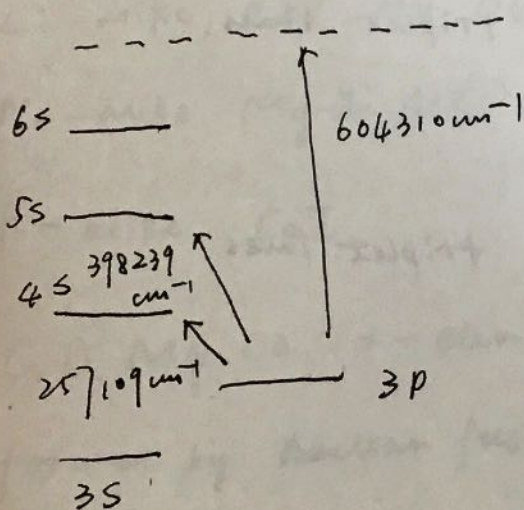
$$3^2P_{3/2, 1/2} \rightarrow 3^2S_{1/2}$$

$$\text{NaI D. } J = 3/2 \quad \Delta E = \frac{A}{2}$$

$$J = 1/2 \quad \Delta E = -A.$$

对外壳层少于满电子数系数. $A > 0$.

ex: S VI Na-like.



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

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

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

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

精细结构分裂量级

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

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

$$\overline{\Delta E} = \frac{Rhc\alpha^2 Z_{\text{eff}}^4}{n^3 l(l+1/2)(l+1)}$$

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

选择定则 (~~Dipole~~ Electric Dipole transition)

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

$$\Delta s = 0.$$

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

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

谱线强度计算.

$$g = 2J + 1.$$

谱线强度 \propto degenerate factor \times 无谱项线强度.

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

Na I D

5890 Å, 5896 Å

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

容易饱和. 两线强度

也会用另一组共振吸收线 $4p \rightarrow 3s$.

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

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

7664.91, 7698.97 Å.

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

7800.27 Å, 7947.60 Å

sub-dwarf. 晚型星. 分子吸收

Ca II 光谱.

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

太阳光谱. 晚型星光谱中很强.

$J 1/2 \rightarrow 1/2$ $\log gf = -0.201$

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

h线 with HE 3970.22 Å 混在一起.

$\lambda_0 = 6.1 \text{ eV}$. DIB (星际弥散星云) 中一般为 Ca^+ 无 He.

Ca II triplet

8498.0 \AA 8542.1 \AA & 8662.1 \AA

晚型星大气中常见. 非饱和. 测金属丰度.

Mg II h & k 2796 \AA - 2803 \AA . doublet.

容易饱和.

Mg II 1240. 1239.

发射线. 星周壳层. 电离气体星云.

C IV $2s \rightarrow 2p$. 1550 \AA 1548 \AA

quasar. AAN. Ca^+ emission line mixed.

行星状星云. 发射线

LOS 上多次吸收.

原子能级寿命

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

电偶极跃迁 $A \sim 10^{08}$ $\tau \sim 10^{-9}$.

HI $2s$ 亚稳态.

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

关于 2431 \AA 对称. 光致电离气体星云. (H II, 行星状星云)

复杂原子

中心场模型 (平均场近似?)

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

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

↓ ↓
与其他 球对称。
电子原子有关。
位置
反迭代求解。

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

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.

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

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 简并法 White Dwarf. Neutron Star.

轨道贯穿效应.

多电子原子

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d.$$

轨道电子数.

每一 nl 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高能级.

He 的第一激发态能级高 $1s^2 \rightarrow 1s2s$.
(主量子数都变了).

角动量耦合.

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

LS 耦合.

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

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

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

单电子

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

① $\hat{S} = 0 \quad \hat{j} = \hat{L}$ 单态 $\hat{S} = 1 \quad \hat{j} = \hat{L} - 1, \hat{L}, \hat{L} + 1$ 三重态

ex: $L \sim S$

$$0III \quad 1s^2 2s^2 2p 3d.$$

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

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

$$l = 1, 2, 3.$$

$$S = 0, 1 \quad \cancel{^1S_1}, \cancel{^1D_2}, ^1P_1, ^1D_2, ^1F_3$$

$$S = 0$$

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

$$S = 1$$

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

ex. j_j 耦合. (一般是重元素 j_j 耦合主导)

也拿 $0III$ 做例子.

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

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

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

$$j = 1, 2.$$

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

$$j = 2, 3.$$

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

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

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

$$j = 1, 2, 3, 4$$

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.

奇偶性因子 $(-1)^{\sum l_i}$

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

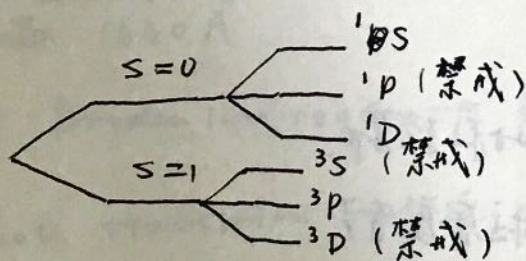
复杂原子的光谱标记

$(2s+1) L_J^{(0)}$
↓
↳ 总轨道角动量 S, P, D

单态, 双态...

同科电子, n, l 相同

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



同科

p^1 与 p^5 相同.

p^2 与 p^4 相同... 以此类推...

He I

基态 $1s^2 \quad ^1S$

第一激发态 $1s \quad ^1S$

$1s2s$ 单态 三重态.

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.

对一给定电子组态和 S . 轨道角动量 L 越大能量越低.

如 Cl $1s^2 2s^2 2p^2$.

只有三个谱项 $1S, 1D, 3P$.

$3P$ 是基态 $1D$ 是第一激发态.

Hund 规则三.

S, L 确定未半满了越小能量越低.

半满以上了越大能量越低

故 $3P_{0,1,2}$ 中 $3P_0$ 能量最低

^{氢于}
DIB 原子产生. 星际吸收线. 不对称轮廓.

星际弥散吸收带. $5H, H_2$ 柱密度有关

Diffuse Interstellar Band.

Helium.

25% 量子质量.

He II Hydrogen-like. 所有谱线波长缩短为 $\frac{1}{4}$.

$Cy \alpha$ 304 \AA . 高红移可以被 FUSE 和 HST 探测到

$H \epsilon$ 1640 \AA .

$\chi_{He} 24.6 \text{ eV}$ $\chi_{He II} 54.4 \text{ eV}$.

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、高电离恒星(中心高温区)。

He I 光谱

两套光谱。单态。三重态

He I 的复合线。

$2p^3P - 4d^3D$ 4471.50 \AA

$2p^3P - 3d^3D$ 5875.70 \AA

$2p^1P - 3d^1D$ 6678.15 \AA

Wolf-Rayet Star.

强星风。光谱线。

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

He II 复合线

He II α 1640 \AA

ACN. Broaden line region. \rightarrow 高电离。

Dipole transition rules. for sophisticated atom.

Δn any.

$\Delta l = \pm 1$

$\Delta S = 0$

$\Delta j = 0, \pm 1$ ($0 \rightarrow 0$ 除外)

$\Delta m_j = 0, \pm 1$

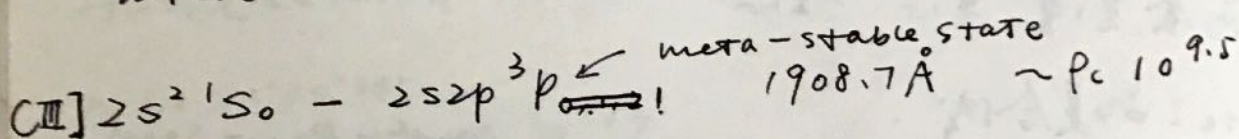
宇称改变。

非严格规则

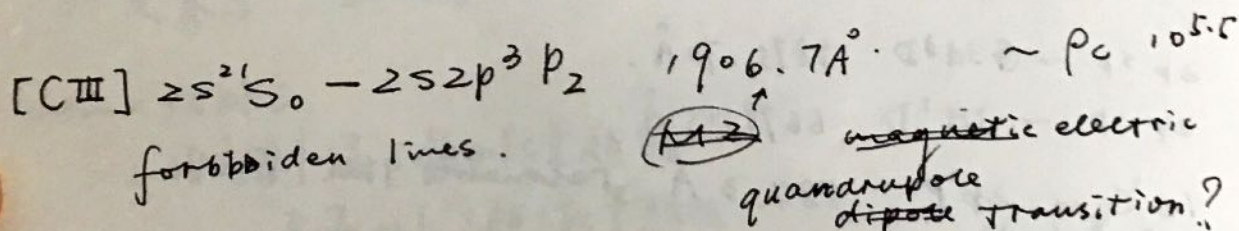
光子一般不改变自旋 $\Delta S = 0$.

相对论效应使不同自旋态混合, 使不同自旋态间跃迁成为可能.

intercombination lines. 禁线



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. $1s^2 2s^2 (95\%) + 1s^2 2p^2 (5\%)$.

单电子 $\Delta l \neq 0$.

~~A12~~

复杂原子

ΔL 可以等于 0, 但 Δl 不能为 0.

Magnetic dipole transition / Electric quadrupole transition

Dipole.

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

$\Delta M = 0, \pm 1$

对称
 $\Delta L = \pm 1$ (单电子).

$\Delta L = 0, \pm 1$ (0-0 X)

$\Delta S = 0$

~~A12~~ E4

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

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

对称不变

组态不变 $\Delta L = 0, \pm 2$ (单电子).

$\Delta L = 0, \pm 1, \pm 2$ (0-0, 0-1 X)

$\Delta S = 0$.

~~A12~~ M2

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

$\Delta M = 0, \pm 1$

对称不变

组态不变. 对所有 $\Delta l = 0, \pm 2$

$\Delta L = 0$

$\Delta S = 0$

禁线

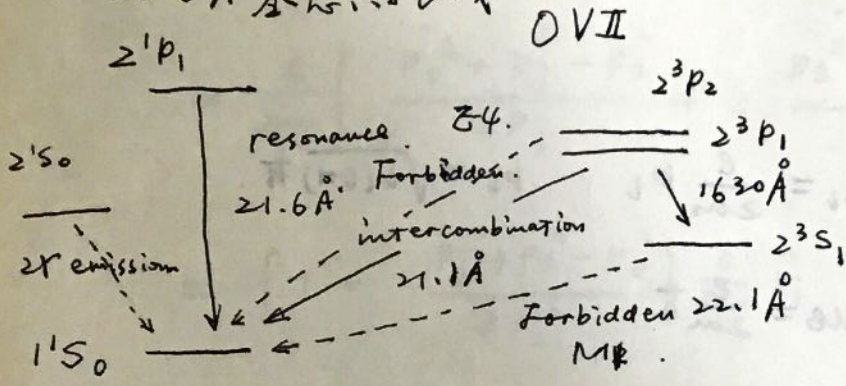
来自于亚稳态. 低密度区域. 即无碰撞退激发. 又无法由电偶极跃迁. 故能寻找其他跃迁形式

类 He I: Mg I.

星系中重要的吸收线 $3s \rightarrow 3p^3 P_{0,1,2} - 3s4s^3 S_1$ $\begin{matrix} 5167 \text{ \AA} \\ 5173 \text{ \AA} \\ 5184 \text{ \AA} \end{matrix}$

O VII 与 He I ~~共振线~~ 等电子序列.

21.6 Å 基态共振线



类 He I.

- W: $1s2p - 1s^2 \quad 1P_1 - 1S_0$ resonance.
- X: $1s2p - 1s^2 \quad 3P_2 - 1S_0$ Z4.
- Y: $1s2p - 1s^2 \quad 3P_1 - 1S_0$ intercombination.
- Z: $1s2p - 1s^2 \quad 3S_1 - 1S_0$ M2.
- $1s2p - 1s^2 \quad 3P_0 - 1S_0$ X

Bowen 荧光发射机制

O III $2p^2 \rightarrow 3p^2 - 3d \rightarrow 3p^2$ $\lambda 303.8035$ He II Ly α 303.783 相近.

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

H Ly β 1026 \AA & OVI

Probing reionization. of H / He.

H, He 附近, 完全吸收.

磁场中的光谱.

原子磁矩.

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

玻尔磁子 $\mu_B = \frac{e}{2m} \hbar$

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

电子自旋磁矩

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

单电子 $s = \frac{1}{2}$.

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

核自旋磁矩.

$\mu_c = \frac{e}{2M} \hbar \ll \mu_s, \mu_l$. 可忽略.

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 $\vec{\mu}_0$ 不在同一方向上. 因为存在 $g_s \approx 2$.

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

$$\hat{\mu}_j = \hat{p}_l \cdot \frac{e}{2m} \cos \langle l, j \rangle + \hat{p}_s \cdot \frac{e}{m} \cos \langle s, j \rangle$$
$$= \frac{e}{2m} \left[\hat{p}_l \cos \langle l, j \rangle + 2 \hat{p}_s \cos \langle s, j \rangle \right].$$

$$= \frac{e}{2m} \left[\frac{p_l^2 + p_j^2 - p_s^2}{2p_j} + 2 \frac{p_s^2 + p_j^2 - p_l^2}{2p_j} \right].$$

$$= \left[1 + \frac{p_j^2 + p_s^2 - p_l^2}{2p_j^2} \right] \frac{e}{2m} \hat{p}_j$$

$$= g_L \cdot \frac{e}{2m} \hat{p}_j$$

g_L : Landé g -factor.

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

特殊情况.

① $s=0 \quad l=j \Rightarrow g_L = 1$

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

$$\mu_s = -g_s \hat{\mu}_0 \cdot \hat{p}_s / \hbar$$

$$\mu_l = -g_l \hat{\mu}_0 \cdot \hat{p}_l / \hbar$$

$$\mu_l = -g_l \hat{\mu}_0 \cdot \hat{p}_l / \hbar$$

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

只考虑 LS 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

$$\begin{aligned} \Delta E &= \vec{\mu}_J \cdot \vec{B} \\ &= g_L \frac{e}{2m} \hat{p}_J \cdot \vec{B} \end{aligned}$$

取 \vec{B} 为 z 方向

$$\begin{aligned} \Delta E &= g_L \frac{e}{2m} m_J \hbar B \\ &= g_L \mu_B m_J B. \quad (\text{分裂大小正比于磁场强度}). \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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 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 $1s^2 2s^2 2p^4$ - γ 态 \rightarrow 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 裂能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.

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

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

$^3P_1 \rightarrow$ 分裂成 3 个能级 $^3P_0 \rightarrow$ 1 个故 3P 在弱磁场中分裂成 8 个能级

能级间隔? 取 $B = 10^3$ G.

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

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

磁场下的光谱.

$E_2 \rightarrow E_1$

无磁场 $h\nu = E_2 - E_1$.

有磁场 $h\Delta\nu = \Delta E_2 - \Delta E_1$

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

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

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

Larmor frequency.

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

Lorentz unit.

$= (m_2 g_2 - m_1 g_1) L$

选择定则

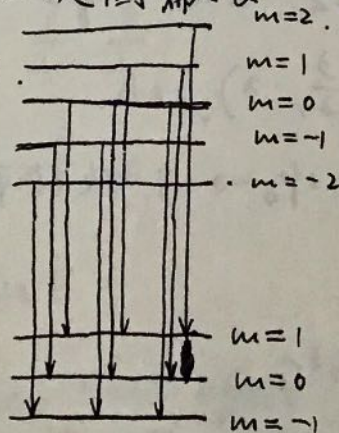
① $\Delta m_J = 0$ ($\Delta J = 0, \Delta m_J \neq 0$). 线偏振 π 线.

② $\Delta m_J = \pm 1$ 左右旋圆偏振 σ 线

正常 Zeeman effect.

$^1D_2 \rightarrow ^1P_1$

1D_2 1P_1
 $S=0,$ $S=0$
 $L=2=J$ $L=J=1$



9种跃迁
 3种能量差
 $\pm L, 0$.

anomalous Zeeman effect

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

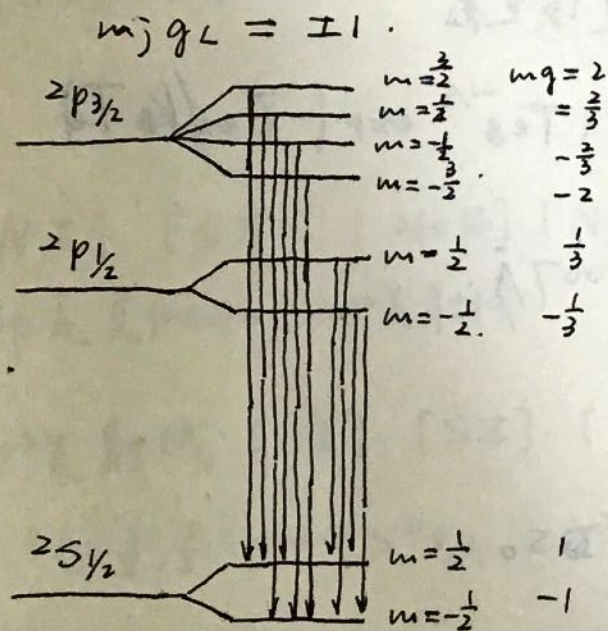
$${}^2P_{3/2} \quad s = \frac{1}{2} \quad l = 1 \quad j = \frac{3}{2} \quad g_L = \frac{4}{3}$$

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

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

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

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



$$\Delta(mg) = \pm \frac{5}{3}, \pm 1, \pm \frac{1}{3}$$

$$\pm \frac{4}{3}, \pm \frac{2}{3}$$

天体中的强磁场.

白矮星 $\sim 10^6 \text{G} \rightarrow$ 大裂距.

Nebular Spectra.

Gaseous Nebulae

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

Planetary Nebula 中心: 正在死亡之恒星 \rightarrow 白矮星

特征: 高温, 低密度

碰撞是激发概率低 \rightarrow 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, 自发跃迁.

荧光机制: 线荧光, 连续荧光.

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

O III: ~~4959~~ 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 \rightarrow 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. $51.8 \text{ \AA} \text{ \& } 88.4 \mu\text{m}$. $3p_2 \rightarrow 3p_1, 3p_1 \rightarrow 3p_0$.

发射率对温度不敏感对电子密度敏感.

C II $158 \mu\text{m}$. $2p_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2}$. 在星爆星系中

O III 紫外发射线.

$5s \rightarrow 3p$ $\lambda 1661, 1666$ 半禁线

星云消光较大.

[C III] 1907 [O III] 1909 . Critical density 不同.

↓
比值测密度.

[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].

$2D_{3/2, 5/2} \rightarrow 4S^0_{3/2}$. $3726, 3729$.

O III Bowen ~~光~~ 发射线.

来自于 He II $\lambda y\alpha$.

resonance scattering.

$3700 \text{ \AA} \sim 3800 \text{ \AA}$. 多组.

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 荧光线. $\lambda 8446$.

通过共振线 1025.76 \AA 吸收 Ly β $\lambda \approx 1025.72 \text{ \AA}$.

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.

双电子激发如 3a n l.

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.

(双激发态能量高于第一电离能).

(过程无辐射产生).

谱线较宽?

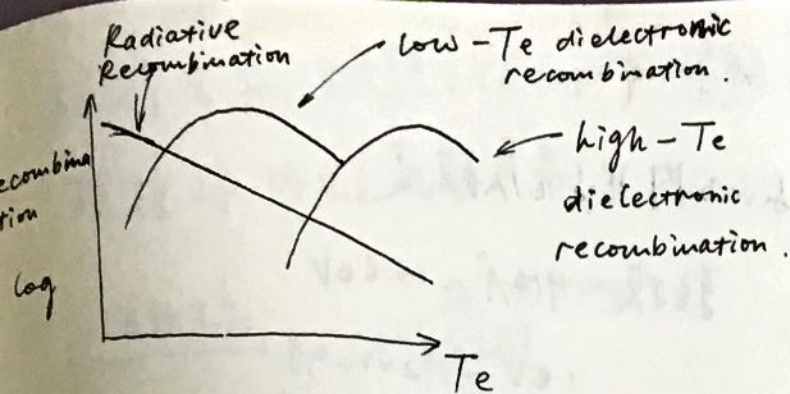
共振自电离态的存在在原子光电离截面中引入一

系列共振峰 (这附近的光子易被吸收形成共振自电离).

复杂离子. 原子复合过程.

C II $\lambda 1335 \text{ \AA}$ 双电子复合谱线. $2s2p^2 \ ^2D \rightarrow 2s^2 2p^2 p$.

双电子复合由跃迁路径与直接复合不同.



重离子复合线.

$C II \lambda 4267 \text{ \AA}$

$O II$ 复合线: $3s, 3p, 3d, 4f$ 跃迁.

$O II$ 大多处于 $3p$

↓ 俘获电子 $O II$

ex: $3p + 4f(^2F)$.

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

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

$2D$ $2F$ $2G$.

$4D$ $4F$ $4G$.

一共 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壳层跃迁

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

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~~ Quasar.

Chandra

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

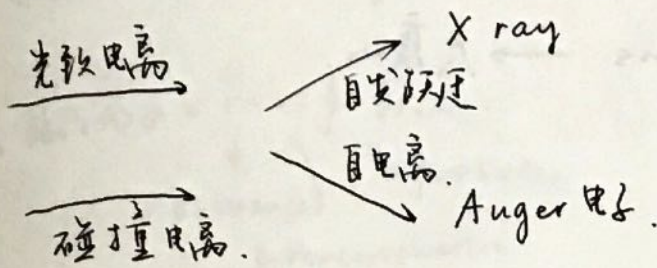
XMM-Newton.

$0.1 \sim 12 \text{ keV}$. 多波段成像.

高度电离离子跃迁. Fe XXVI Ly α . 7.013 keV . 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。

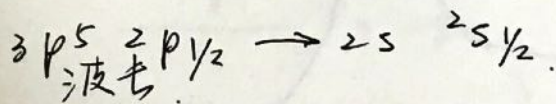
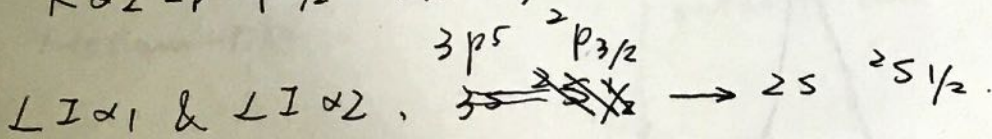
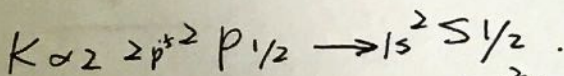
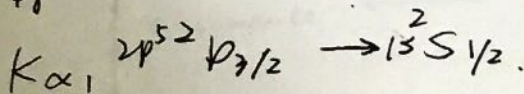
K 壳层跃迁到 $n=1$ 发射线 $\Delta L = \pm 1, \Delta J = 0, \pm 1$
($0 \rightarrow 0$ 禁戒)

L ...

M ...

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

以 $^{48}_{28}Cs$ $5s^2$ 为例。



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

电离度减少而波长移动。

中性 Fe 之波长反而比一部分高电离 Fe $K\alpha$ 线短。

AGN 软 X 射线. Fe 发射线 \rightarrow 连续谱.

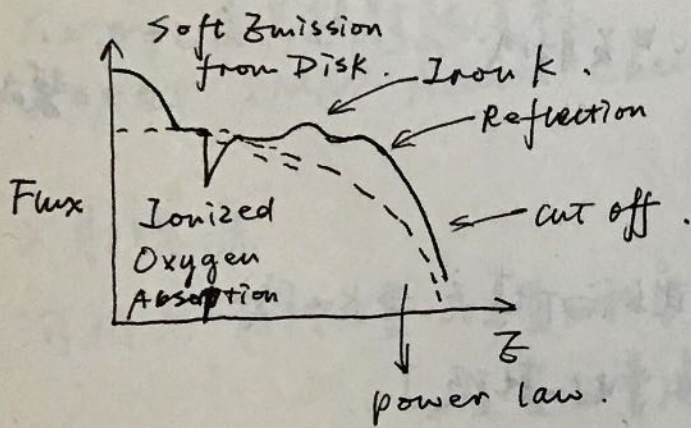
天鹅座 X-1.

X 射线光变时标, ~ 10 ms \rightarrow 尺度小.

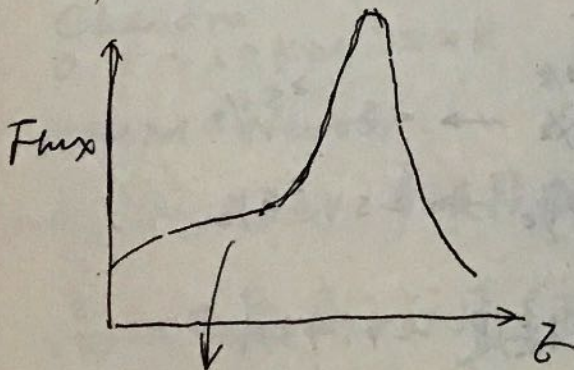
伴星 $\sim 15 M_{\odot}$

\Rightarrow 伴星

AGN. X 射线最中心位置.



Broad $K\alpha$ in BH.



Doppler shift & gravitational red shift.

真氦粒子 X 射线 ($\text{Ly}\alpha, \text{Ly}\beta$).

OVIII. Ne X. Mg XII. Si XIV.

真氦离子 n, i, f 跃迁
 resonance
 intercombination
 forbidden

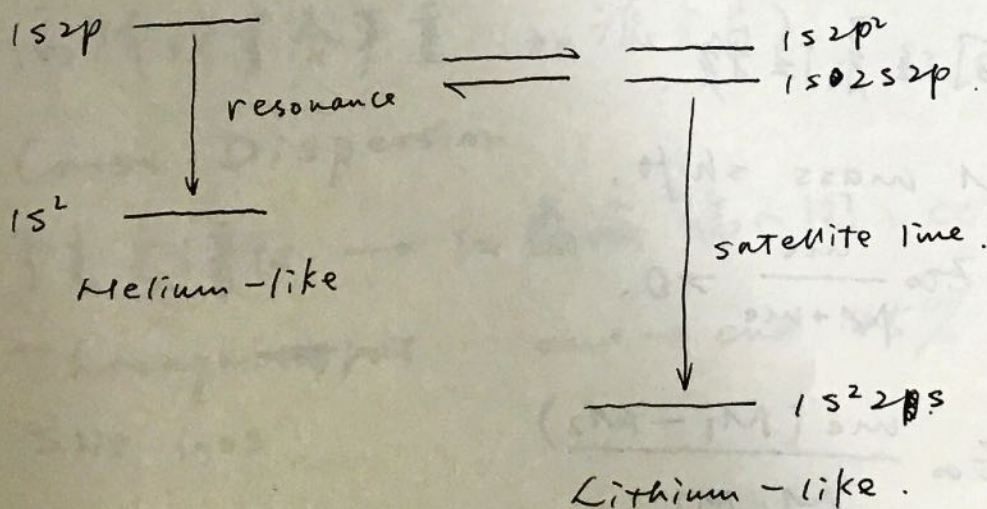
OVII.

卫星线 satellite lines

C, N, O, Fe 高度电离, 双电子复合线. 尤其是共振线.

真 H 原子辅线系 $1s nl \leftarrow 2p nl$.

真 He 原子辅线系 $1s^2 nl \leftarrow 1s 2p nl$.



辅线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 AAN.

Markarian Catalog.

无宽线区.

日冕红线 Fe X 6374 Å.

① green line Fe XIV 5302 Å.

yellow line Ca XV 5694 Å.

PAH 吸收 (多环芳香烃) 红外.
↑ 发射.

AAN 光谱

多电子同位素位移.

normal mass shift.

$$\delta E = -Z\alpha \frac{m_e}{M+m_e} > 0.$$

$$\Delta E \approx Z\alpha \frac{m_e (M_1 - M_2)}{M_1 M_2}.$$

光谱仪和光谱观测

Grating.

Prism.

Prism grating on a prism. (~~透射光栅~~)?

Long-slit / multi-slit

Multi-fiber.

Blazed Grating.

长缝光谱仪

resolution $\Delta\lambda$.

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

分辨率高 \uparrow 信噪比低

高阶项重合严重 (加滤光片).

Cross Dispersion.

分光光谱仪 \rightarrow 蓝两端不同, CCD.

Throughput. end \rightarrow end 45%.

Slit loss

On-chip binning. 多个 pixel 合成 - 1 pixel. 提高信噪比.

~~大口径~~

远端天顶 \rightarrow 大口径成为接镜分光.

Solution.

- 1) slit along the dispersion.
- 2) ADC. Atmospheric Dispersion corrector.

Multiobject Spectroscopy,

Multi-slit, (不同 slit 光谱范围不一样).

↓

两块 CCD.

Slit conflict (~~两个~~两个平行光谱).

High throughput output.

Choose slit width & length.

Good sky subtraction.

multi fiber system.

large fields.

uniform wavelength

Efficient use of detector data.

多电子原子、同位素位移。

异常。
↓

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

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

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

$\Rightarrow 21 \text{ cm}$ 谱线.

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 I b?

Slitless Spectroscopy. (prism).

wide-field surveys. only for bright source.

Spectroscopy Observing.

Flat field correction.

flux standard (calibration)

wavelength calibration.

if no ADC.

→ 电子电路本底
Bias and overscan correction.

Flat-fielding → 有一部分 CCD 没有被照射到
(现在的 CCD 为了可以直接用 overscan
OS exposure time. scan 当 bias 减掉).

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

SAO Image ds9.

poly fit. then normalized.

Two major problems.

1. fringing (in the red) interference
(加减项).

2. Slit width / illumination pattern.

↓
Science image.

2D → 1D.

determine the extraction band.

Sky subtraction.

(为每一 pixel 建立精确的 sky)

Wavelength calibration.

use lamp-line to derive function.

Flux calibration.

用标准星定标. 早型星 A0.

掩星. 视向速度

↳ 系外行星.

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

SDSS. 大视场多色巡天.

drift scan mode.

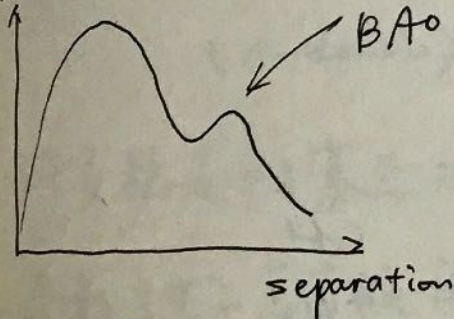
DESI Dark Energy Spectroscopic Instrument.

Subaru PFS Project

BAO. (光和重子一起传播 40 万年)

↳ 40 万年后脱耦. 重子留在原地

frequency

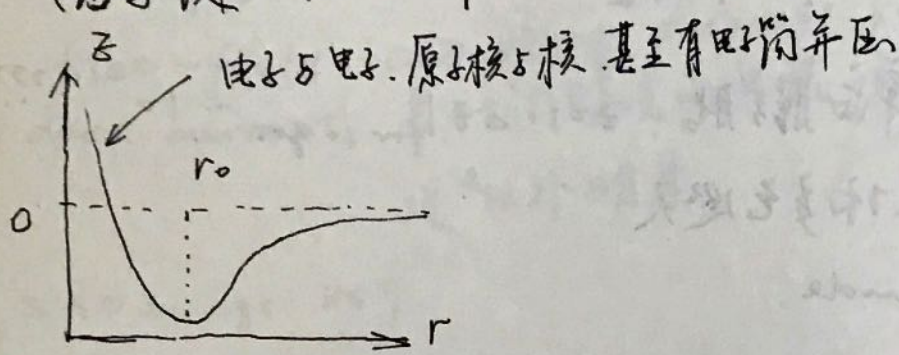


BAO peak. (观测不同红移距离)

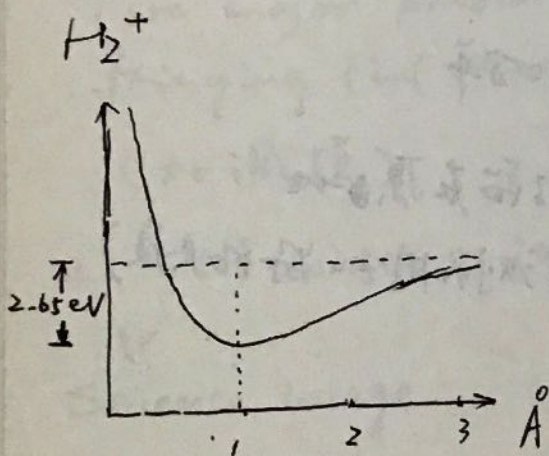
分子光谱. Molecular Spectrum.

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^+



行星大气.

彗星.

冷星. 等.

星际云.

主要是河内.

H_2

CO

Carbon
Monoxide

CH

CN.

OH.

分子的形成:

需要尘埃颗粒作为媒介.

转动和振动.

Born - Oppenheimer 近似
电子和原子核运动完全分离考虑。

电子运动 \rightarrow 振动 \rightarrow 转动。

↓
紫外、可见光 红外 亚毫米、甚至射电。

bonding & anti-bonding.

电子轨道角动量 (LS 耦合)。

在轴、方向上是常数 $\rightarrow M_L$ 。

投影

$$L = |M_L|$$

$$L = 0, 1, 2, 3$$

$$\Sigma \quad \Pi \quad \Delta \quad \Phi$$

简并度 1 2 2 2

电子 $\sigma \quad \pi \quad \delta \quad \phi$

(Λ -double)

许多稳定分子基态为 Σ (双电子分子) $\left\{ \begin{array}{l} \Sigma^+ \text{ 对某轴对称} \\ \Sigma^- \text{ 反对称} \end{array} \right.$

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

CH, OH, NO 基态 Π^2

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^+ . Ω 基态为 Σ^+g

同核分子的电子态标记.

如 $^1\Sigma_g^+$ 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

H₂分子: 电离 15.422 eV. 离解 4. eV

对于给定的 S 和 Λ . 电子态能量表示为

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

用 $\Lambda + \overset{M_S}{\square}$ 来标记光谱项

$$^{2S+1}\Lambda_{\Lambda + M_S}$$

$$\Omega \equiv |\Lambda + M_S|$$

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

Hund情形 a) $\Lambda = |M_L|$

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

$$J = 0 + \Omega$$

↓
核自旋量子数.

b) 自旋最后耦合. 先把核 0 和 Ω Λ 耦合.

还可以再和核自旋耦合. $F = J + I$.

双原子分子 Schrödinger Eq.

$$(H - E)\psi(r_A, r_B, r_i) = 0.$$

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

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

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

$$(H_{el} - E_e)\varphi_e(\vec{r}_i) = 0.$$

bonding & antibonding.

核波函数

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

$\chi_N = \chi_v \chi_r$. 振动与转动.

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

$$I_0 = \mu R_0^2$$

无转动零点能.

径向: 振动, \rightarrow 近似为简谐振子.

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

\rightarrow 零点能.

转动能 \ll 振动能.

HD 零点能比 H_2 低很多 \rightarrow 促进轻化.

分馏
 H_2 / D_2 .

HCO^+ / DCO^+ .

^{13}C 和 ^{12}C 也有但不明显.

振动能级数目: 势阱深度, 曲率, 原子质量.

Morse 势.

$$E_v = h\nu_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - h\nu_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2.$$

$$D_0 = D_e - ZPE.$$

分子跃迁:

纯转动跃迁, 微波, 射电.

振动跃迁.

纯转动.

电偶极情况. (同核分子产生不了永久的电偶极)

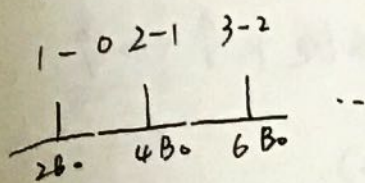
$$\Delta J = \pm 1$$

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

$$= 2B_0 J'$$

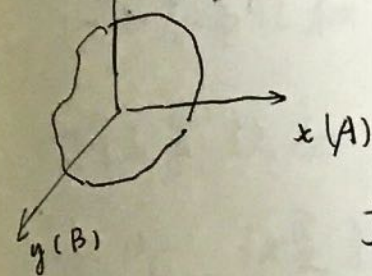
$A \propto |u|^2$. 故电偶极距越大, 强度电偶极大.

就算是 NaCl 也会被探测到。
非常规则的光谱。间距为 $2B_0$ 。



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

刚体转动动能



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

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

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

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

1) 线性结构。所有双原子。CO₂, HCN.

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

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

2) 球形对称 CH₄, C₆₀

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

3) 一般对称 prolate $I_{xx} = I_{yy} > I_{zz}$.

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

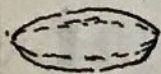
prolate. correction. $C > B$ ($I_C < I_B$).



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

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 .

对称陀螺转动能量-平方.

$$h^2 J(J+1).$$

z 轴分量. $K = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm J$.

固定 z 轴 $M = 0, \pm 1, \dots, \pm J$

分量.

对称陀螺转动的跃迁规则.

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

1) 线性. 若对称. 无偶极跃迁.

2) 球形对称. 无偶极.

3) 一般对称. 某轴有偶极. 有例外 H_3^+ .

CO 稳定性 $D_0 = 11 \text{ eV}$.

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

估算分子云密度

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

1-0 容易饱和. 可以用更高阶跃度.

同位素效应

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

CO 的永久偶极矩很小. 对电偶极跃度. Einstein
跃度系数 较小

其他分子 - 转动光谱

大部分通过观测射电转动谱辨认分子 $\Omega = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$
 $2\pi \nu$. $S = \frac{1}{2}$ $L = 1$ $J = 0 + \Omega$

OH 转动光谱

Hund case (a)

$I = \frac{1}{2}$ (Hyperfine)

CH 转动光谱

Hund case (b)

$N = 0, 1, 2, 3, 4 \dots$ $L = 1$
 $\vec{N} = 0, 1, 2, 3, 4 \dots$ $J = N + S$

CS. infra region 吸收. 高阶光谱不吸收.

H₂ 同核分子. 无偶极辐射.

由电四极辐射.

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

主要在中和近红外.

$J+1 \rightarrow J$ 纯转动发射线.

$$A_{J+1, J} = \frac{64\pi^6}{3h} \frac{J+1}{2J+3} \bar{\nu}^3 \mu^2$$

$\bar{\nu} \rightarrow \text{cm}^{-1}$

J较大时 $A_{J+1, J} \propto (J+1)^3$

LTE下.

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

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

光薄情况下:

$$I_{J+1, J} \propto h\nu A_{J+1, J} N_{J+1}$$

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

辐射最强和分子最多可能不是同一能级.

LTE吸收...

温度效应.

$$\frac{p_J}{p_0} = \frac{g_J}{g_0} \exp\left(-\frac{E_J}{k_B T}\right)$$

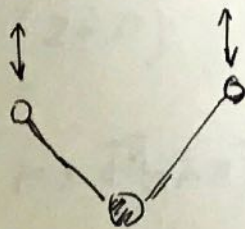
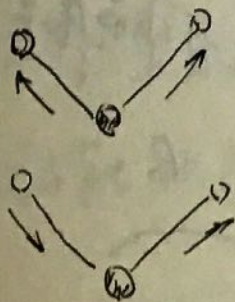
由于 E_J 较小, 即便在低温, 能级上也有 ~~有~~ 很多分子.
低密度下非 LTE, 转动能级分布并未

振动跃迁

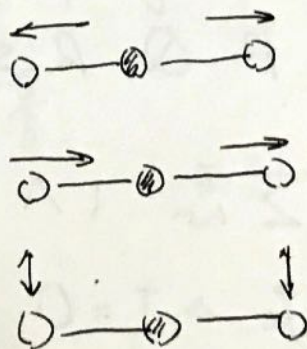
一分子有 n 个原子. 自由度? $3n - 6$; 自由度

$3n - 6$; 自由度

以 H_2O 为例



CO_2



简谐振动 电偶极 $\Delta v = \pm 1$.

非简谐 $\Delta v = \pm 1$ 最强.

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

振动转动能级

$$\Delta E = E_{v' J'} - E_{v J}$$

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

R支

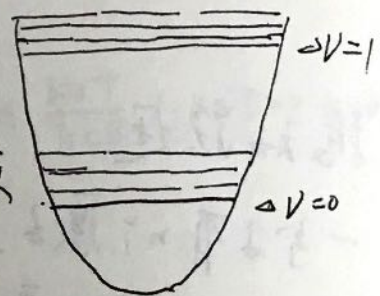
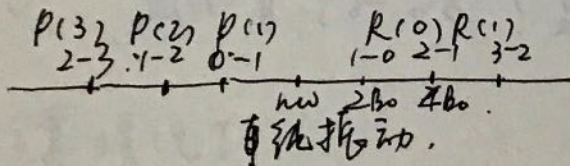
P支.

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

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

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

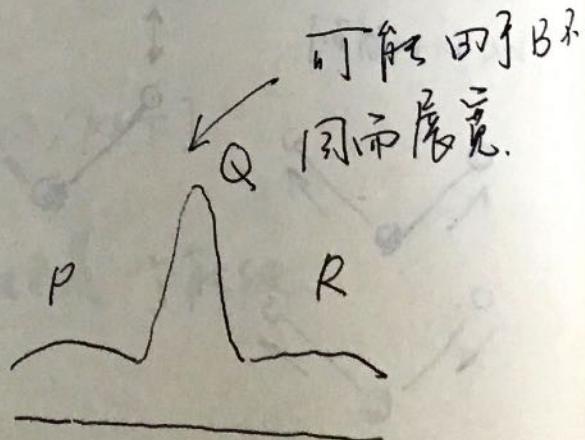
由于这里 $\Delta J = 0$ 是禁戒的. 只有 P.
(Σ 电子)



-2 -1 0 1 2
O P Q R S

非 Σ 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 行星大气, 矮行星, 吸收线.

同位素效应.

振动基态变化.

重基态而低能级移动.

转动间距变化.

重, ~~能级差~~ 能级间距变小.

H_2 (电四极跃迁)

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

未配级
 \nearrow

-2 $+2$ $0(J'')$ $Q(J'')$ $S(J'')$,
 0 Q S

$$S(1) (3-1).$$

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

并合星系, H_2 振动转动谱.

电子能级分布

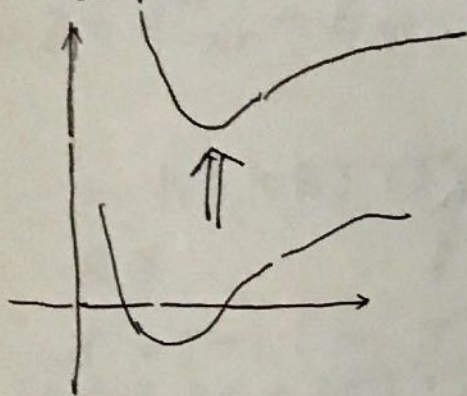
分子电子能级.

电子能级往往高于高解能.

非热激发. 碰撞. 磁场.

行星冕. 冷星.

势能曲线改变



$$\Delta S = 0$$

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

$$g \leftrightarrow u \quad (g \leftrightarrow g, u \leftrightarrow u \text{ 禁戒})$$

Σ 态 \leftrightarrow 允许.

H₂ 两个主要电子跃迁带.

Werner (1008 Å) C' Π_u - X' Σ_g^+

Cyman (1108 Å) B' Σ_u^+ - X' Σ_g^+

振动.

Frank-Condon

振动问题.

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

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

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: $J' = J + 1$

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

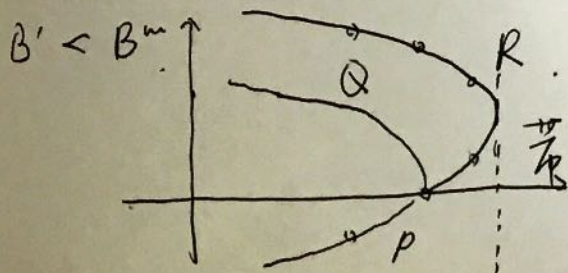
P, Q, R.

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

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

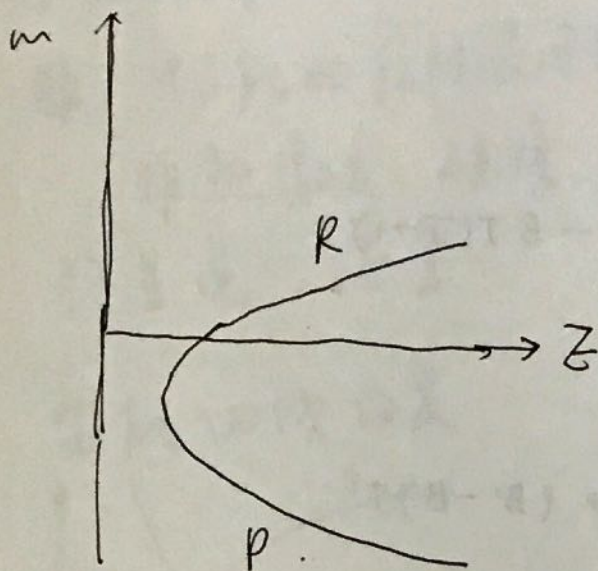
$$\nu = \nu_0 + (B' + B)m + (B' - B)m^2$$

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



箭头蓝端。(最后P, R会交叉).

$B' > B$. 箭头在红端 (开口向高能)



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

脉冲发射 MASER 发射 (转动、振动)

