

# Глава 6. Магнитные свойства элементарных частиц и атомов. Спин-орбитальное взаимодействие

## 6.1 Орбитальный момент электрона

Магнетизм атома обусловлен тремя причинами:

- а) орбитальным движением электронов;
- б) магнитным моментом электрона;
- в) магнитным моментом атомного ядра.

Магнитное поле, обусловленное магнитным моментом ядра, обычно много меньше магнитного поля, порождаемого орбитальным движением электронов и спином электронов, и поэтому здесь во внимание не принимается.

Можно показать, что, как и в классической, так и в квантовой теории магнитный момент электрона  $\mathbf{M}_l$  определяется моментом импульса орбитального движения  $\mathbf{L}_l$ :

$$\mathbf{M}_l = -\mu_B \mathbf{L}_l / \hbar, \quad (1)$$

где  $\mu_B = e\hbar/(2m_e) = 9,27 \cdot 10^{-24}$  Дж/Тл – магнетон Бора в системе СИ (в системе СГС  $\mu_B = e\hbar/(2m_e c) = 9,27 \cdot 10^{-21}$  эрг/Гс), где  $m_e$  – масса электрона,  $\hbar$  – постоянная Планка,  $e$  – заряд электрона.

В состоянии  $\Psi_{nlm_l}$  модуль и проекция на ось  $z$  орбитального момента  $\mathbf{L}_l$  задается формулами:

$$L_l = \hbar \sqrt{l(l+1)}, \quad (2)$$

$$L_{lz} = m_l \hbar, \quad (3)$$

где  $l$  и  $m_l$  – орбитальное и магнитное орбитальное квантовые числа. Следовательно, модуль и проекция магнитного орбитального момента будет выражаться следующим образом:

$$M_l = \frac{\mu_B}{\hbar} L_l = \mu_B \sqrt{l(l+1)}, \quad (4)$$

$$M_{lz} = \frac{\mu_B}{\hbar} \dots m_l. \quad (5)$$

Так как магнитное квантовое число может принимать значения  $m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ ; то возможны  $(2l+1)$  способа ориентации орбитального (магнитного) момента относительно выбранного направления  $z$ . Углы, которые образует вектор  $\mathbf{L}_l$  с осью  $z$ , можно найти по формуле:

$$\cos(\mathbf{e}_z \mathbf{L}_l) = L_{lz} / L_l, \quad (6)$$

где  $(\mathbf{e}_z \mathbf{L}_l)$  – искомый угол,  $\mathbf{e}_z$  – единичный вектор, направленный по оси  $z$ . С учетом выражения значений моментов через квантовые числа получим:

$$\cos(\mathbf{e}_z \mathbf{L}_l) = m_l / \sqrt{l(l+1)}. \quad (7)$$

Так как максимальное абсолютное значение  $m_l = l$ , то угол  $(\mathbf{e}_z \mathbf{L}_l)$  не может быть равен 0 или  $\pi$ , то есть вектор  $\mathbf{L}_l$  не может быть ориентирован строго вдоль некоторого направления. Схематически различные возможные ориентировки орбитального момента приведены на рис. 1

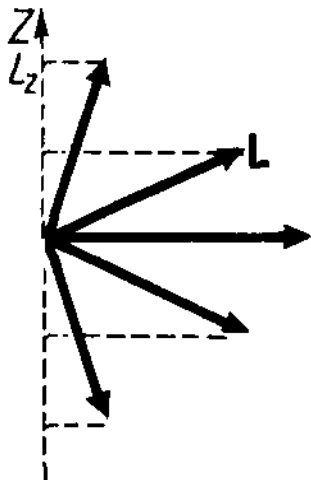


Рис. 1 Схема возможных ориентаций орбитального момента

Эта дискретность орбитального (или магнитного) момента называется *пространственным квантованием*.

Можно показать, что проекции момента импульса  $\mathbf{L}$  обладают следующими коммутационными соотношениями:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x, [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y, [\hat{L}_{x,y,z}, \hat{L}^2] = 0. \quad (8)$$

Таким образом, операторы проекций момента импульса  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$  не коммутируют друг с другом, следовательно, нельзя одновременно измерить все три проекции вектора  $\mathbf{L}_l$ , а можно лишь измерить модуль вектора  $|\mathbf{L}_l|$  и одну из его проекций, может быть наглядно интерпретировано следующим образом. Представим себе, что вектор  $\mathbf{L}_l$ , прецессирует вокруг избранного направления (рис. 2). В этом случае вполне определенное значение имеет лишь проекция вектора  $\mathbf{L}_l$ , на направление, вокруг которого он прецессирует. Две другие проекции вектора  $\mathbf{L}_l$ , на направления, лежащие в плоскости, перпендикулярной оси прецессии, остаются полностью неопределенными.

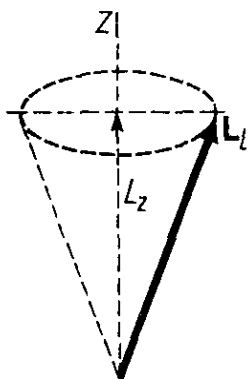


Рис. 2 Прецессия момента импульса

Отношение модуля магнитного момента к модулю механического момента в единицах  $\mu_B/\hbar$  называется гиромагнитным отношением. Иначе говоря, если отношение этих величин представить в виде

$$\frac{M}{L} = g \frac{\mu_B}{\hbar}, \quad (9)$$

то безразмерное число  $g$  называется гиромагнитным отношением. Гиромагнитное отношение характеризует соотношение между магнитным и механическим моментами системы. Из формулы (1) следует, что для орбитального магнитного и механического моментов электрона гиромагнитное отношение  $g_l$  равно единице, т. е.

$$g_l = 1. \quad (10)$$

## 6.2 Спин и полный момент электрона

Электрон обладает собственным моментом импульса, получившим название *спина*. Объяснить возникновение спина какой-то классической моделью оказалось невозможным. Поскольку спин является моментом импульса в классическом описании, он является вектором  $\mathbf{L}_s = (L_{sz}, L_{sy}, L_{sx})$ . Его можно складывать с другими моментами импульса по правилам векторного сложения. Однако его принципиальное отличие от орбитального момента импульса обуславливается тем, что орбитальный момент импульса как динамическая переменная выражается через другие динамические переменные – декартовы координаты и импульсы, в то время как динамическая переменная, названная спином, через другие известные динамические переменные не выражается.

Для операторов модуля спина и его проекций выполняются те же коммутационные соотношения, что и для момента импульса. Для объяснения экспериментальных результатов необходимо считать собственные значения любой декартовой проекции оператора спина равным  $\hbar/2$  и  $-\hbar/2$ :

$$L_{sz} = \hbar m_s, \quad (11)$$

где  $m_s = \pm 1/2$ . Модуль механического момента, связанного со спином, определяется спиновым квантовым числом  $s$  (для электрона  $s = 1/2$ ) по аналогии с орбитальным моментом:

$$L_s = \hbar \sqrt{s(s+1)}. \quad (12)$$

Помимо собственного механического момента – спина, у электрона есть собственный магнитный момент, который связан с механическим моментом соотношением:

$$\mathbf{M}_s = -\frac{e}{m} \mathbf{L}_s = -2 \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L}_s. \quad (13)$$

То есть гиромагнитное отношение для спина равно 2:

$$g_s = 2. \quad (14)$$

Полный момент импульса электрона является суммой орбитального момента и спинового моментов:

$$\mathbf{L}_j = \mathbf{L}_l + \mathbf{L}_s. \quad (15)$$

где  $\mathbf{L}_l$  – орбитальный момент импульса электрона,  $\mathbf{L}_s$  – его спин. Известно, что модуль момента импульса всегда квантуется формулами вида:

$$L_l = \hbar\sqrt{l(l+1)}, \quad L_s = \hbar\sqrt{s(s+1)} \quad (16)$$

Так как полный момент  $\mathbf{L}_j$ , является также моментом импульса, то его модуль

$$L_j = \hbar\sqrt{j(j+1)}, \quad (17)$$

где  $j$  – квантовое число полного момента. Определим  $j$ . Возможные проекции векторов  $\mathbf{L}_l$ , и  $\mathbf{L}_s$  на ось  $z$  нам известны:

$$L_{lz} = \hbar m_l, \quad m_l = (-l, -l+1, \dots, l-1, l); \quad (18)$$

$$L_{sz} = \hbar m_s, \quad m_s = (-s, -s+1) = (-1/2, 1/2). \quad (19)$$

Из (15) следует, что

$$L_{jz} = L_{lz} + L_{sz}. \quad (20)$$

С другой стороны, проекция  $L_{jz}$  должна квантоваться следующим образом:

$$L_{jz} = \hbar m_j, \quad m_j = (-j, -j+1, \dots, j-1, j). \quad (21)$$

При заданном  $l$ , проекция  $L_{jz}$  может принимать 2 ряда значений в зависимости от  $m_s$ :

$$L_{jz} = \hbar(-l-1/2), \hbar(-l-1/2+1), \dots, \hbar(l-1/2-1), \hbar(l-1/2);$$

$$L_{jz} = \hbar(-l+1/2), \hbar(-l+1/2+1), \dots, \hbar(l+1/2-1), \hbar(l+1/2).$$

Из сравнения с (21) следует, что квантовое число  $j$  может принимать два значения:

$$j = (l-1/2, l+1/2). \quad (22)$$

Или в общем виде:

$$j = |l-s|, \dots, (l+s). \quad (23)$$

Полный магнитный момент электрона равен сумме векторов орбитального магнитного момента электрона и спинового магнитного момента:

$$\mathbf{M}_j = \mathbf{M}_l + \mathbf{M}_s. \quad (24)$$

причем моменты  $\mathbf{M}_l$  и  $\mathbf{M}_s$  определяются формулами (1) и (13). Гиромагнитное отношение для спинового момента не равно гиромагнитному отношению для орбитального момента. Поэтому вектор полного магнитного момента электрона не коллинеарен вектору полного механического момента.

### 6.3 Орбитальный, спиновый и полный механический и магнитный моменты атома

Полный механический и магнитный моменты атома складываются из механических и магнитных моментов и спинов и спиновых магнитных моментов электронов, образующих

электронную оболочку атома. Однако поведение вектора полного механического (и магнитного) момента атома зависит от способа и последовательности сложения отдельных слагаемых. Прежде всего, рассмотрим общий метод сложения моментов импульса с учетом пространственного квантования.

Пусть имеются два орбитальных момента  $\mathbf{L}_1$  и  $\mathbf{L}_2$ , модули которых определяются квантовыми числами  $l_1$  и  $l_2$  т.е.

$$L_1 = \hbar\sqrt{l_1(l_1+1)}, \quad L_2 = \hbar\sqrt{l_2(l_2+1)}. \quad (25)$$

Модуль суммы моментов

$$\mathbf{L}_L = \mathbf{L}_{l_1} + \mathbf{L}_{l_2} \quad (26)$$

с учетом пространственного квантования равен

$$L_L = \hbar\sqrt{L(L+1)}, \quad (27)$$

причем  $L$  – квантовое число суммарного орбитального момента – может принимать одно из следующих значений:

$$L = |l_1 - l_2|, |l_1 - l_2| + 1, \dots, (l_1 + l_2) - 1, (l_1 + l_2), \quad (28)$$

Число способов, которыми могут складываться два момента, равно числу возможных значений  $L$ .

Пусть для определенности  $l_1 > l_2$ . Тогда формула (28) может быть записана в виде

$$L = l_1 - l_2, l_1 - l_2 + 1, \dots, l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2, \quad (29)$$

В этой последовательности чисел до нуля не хватает  $1, 2, \dots, l_1 - l_2 - 1$ , т.е.  $l_1 - l_2 - 1$  чисел.

Поэтому число членов в этой последовательности равно

$$(l_1 + l_2) - (l_1 - l_2 - 1) = 2l_2 + 1. \quad (30)$$

Аналогично рассматривается случай  $l_2 > l_1$ , для которого число различных способов взаимной ориентации равно  $2l_1 + 1$ . Обобщая, получим число различных способов взаимной ориентации

$$N_{l_1 l_2} = 2 \min(l_1, l_2) + 1. \quad (31)$$

где  $\min(l_1, l_2)$  означает меньшее из чисел  $l_1$  и  $l_2$ .

Проекция суммарного момента  $\mathbf{L}_L$  на избранное направление, например на ось  $z$ , даются обычной для механической момента формулой:

$$L_{Lz} = \hbar m_L, \quad m_L = (-L, -L + 1, \dots, L - 1, L). \quad (32)$$

Следовательно, полное число различных ориентации полного момента  $\mathbf{L}_L$  относительно избранного направления равно  $(2L + 1)$ . Правила сложения нескольких моментов получаются в результате последовательного применения правила для сложения двух моментов.

Правила сложения спиновых магнитных моментов аналогичны только что изложенным. Для двух электронов со спинами  $s_1$  и  $s_2$  и спиновыми моментами  $\mathbf{L}_{s_1}$  и  $\mathbf{L}_{s_2}$  имеем вектор суммарного спинового момента:

$$\mathbf{L}_S = \mathbf{L}_{s_1} + \mathbf{L}_{s_2}, \quad (33)$$

причем модель этого момента:

$$L_S = \hbar\sqrt{S(S+1)}, \quad (34)$$

где  $S$  – квантовое число суммарного спина, оно может принимать значения:

$$S = |s_1 - s_2|, \dots, (s_1 + s_2) = 0, 1. \quad (35)$$

Проекция суммарного спина дается формулой:

$$L_{S_z} = \hbar m_S, \quad m_S = (-S, -S+1, \dots, S-1, S). \quad (36)$$

Эти правила легко обобщаются на произвольное число электронов  $N$ . Тогда

$$\mathbf{L}_S = \sum_{i=1}^N \mathbf{L}_{s_i}, \quad (37)$$

$$S = \begin{cases} \frac{1}{2}N, \frac{1}{2}N-1, \dots, 0, & (\text{при } N \text{ четном}); \\ \frac{1}{2}N, \frac{1}{2}N-1, \dots, \frac{1}{2}, & (\text{при } N \text{ нечетном}); \end{cases} \quad (38)$$

а формула для проекции суммарного спина остается прежней (36) и число возможных ориентаций суммарного спина  $(2S+1)$ .

Свойства атома зависят от того, как происходит образование *полного момента атома*. Можно представить два пути.

1) Орбитальный момент каждого электрона атома складывается со спиновым моментом этого электрона, образуя полный момент электрона  $\mathbf{L}_j$ . После этого полные моменты  $\mathbf{L}_j$  различных электронов атома складываются между собой, образуя полный момент атома  $\mathbf{L}_J$ . Такая связь электронов в атоме называется  **$(j, j)$ -связью**.

2) Орбитальные моменты различных электронов атома складываются друг с другом, образуя полный орбитальный момент атома  $\mathbf{L}_L$ . Спины отдельных электронов складываются друг с другом, образуя полный спиновый момент атома  $\mathbf{L}_S$ . После этого полный орбитальный момент атома складывается с полным спиновым моментом атома, образуя полный момент атома  $\mathbf{L}_J$ . Такая связь электронов в атоме называется  **$(L, S)$ -связью**.

Анализ экспериментального материала показывает, что в большинстве случаев осуществляется  $(L, S)$ -связь.

Рассмотрим полный момент атома в случае  $(L, S)$ -связи:

$$\mathbf{L}_J = \mathbf{L}_L + \mathbf{L}_S, \quad (39)$$

где  $\mathbf{L}_L$  – суммарный орбитальный момент атома,  $\mathbf{L}_S$  – суммарный спиновый момент атома. Из формул сложения моментов следует, что модуль полного момента атома определяется формулой:

$$L_J = \hbar\sqrt{J(J+1)}, \quad (40)$$

а  $J$  – квантовое число полного орбитального момента атома – может принимать одно из следующих значений:

$$J = |L - S|, |L - S| + 1, \dots, (L + S) - 1, (L + S). \quad (41)$$

Квантовое число  $J$  может быть как целым, так и полуцелым числом, в зависимости от квантового числа суммарного спина. Число способов, которыми может быть сформирован полный момент атома, равно:

$$N_{LS} = 2 \min(L, S) + 1. \quad (42)$$

Обычно  $L > S$ , поэтому  $N_{LS} = 2S + 1$ .

Проекция полного момента на ось  $z$  может принимать следующие значения:

$$L_{Jz} = \hbar m_J, \quad m_J = (-J, -J+1, \dots, J-1, J). \quad (43)$$

Всего допустимо  $(2J+1)$  способов ориентации полного момента.

Полный магнитный момент атома  $\mathbf{M}_{полн}$  равен векторной сумме полного орбитального магнитного момента  $\mathbf{M}_L$  и полного спинового магнитного момента  $\mathbf{M}_S$ :

$$\mathbf{M}_{полн} = \mathbf{M}_L + \mathbf{M}_S, \quad (44)$$

причем

$$\mathbf{M}_S = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L}_S, \quad \mathbf{M}_L = -g_l \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L}_L. \quad (45)$$

Так как  $g_s = 2$ , а  $g_l = 1$ , то полный магнитный момент атома не лежит на одной линии с полным механическим моментом. В изолированном атоме как изолированной механической системе полный механический момент постоянен. Следовательно, вектор  $\mathbf{L}_J$  сохраняет свое направление в пространстве, а векторы суммарного орбитального момента  $\mathbf{L}_L$  и суммарного спина  $\mathbf{L}_S$  прецессируют вокруг направления полного момента. Благодаря этому векторы суммарных орбитального и магнитного моментов также прецессируют вокруг направления полного механического момента и вместе с ними прецессионное движение совершает и полный магнитный момент атома  $\mathbf{M}_{полн}$ . Полный магнитный момент атома

$$\mathbf{M}_{полн} = \mathbf{M}_J + \mathbf{M}_\perp, \quad (46)$$

где  $\mathbf{M}_J$  – составляющая полного магнитного момента, параллельная  $\mathbf{L}_J$ ;  $\mathbf{M}_\perp$  – составляющая полного магнитного момента, перпендикулярная  $\mathbf{L}_J$ . Прецессионное движение совершается быстро. Поэтому в явлениях, зависящих от полного магнитного момента атома, происходит обычно усреднение полного магнитного момента атома по многим периодам прецессии. Среднее значение перпендикулярной составляющей полного магнитного момента равно нулю. Поэтому среднее значение полного магнитного момента сводится к  $\mathbf{M}_J$ . Именно  $\mathbf{M}_J$  обычно называют *полным магнитным моментом атома*.

Модуль полного магнитного момента можно аналогично орбитальному и спиновому моментам записать в виде:

$$M_J = g_J \frac{\mu_B}{\hbar} L_J = g_J \mu_B \sqrt{J(J+1)}, \quad (47)$$

где величина  $g_J$  называется *фактор (множитель) Ланде* и определяется следующей формулой:

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (48)$$

Фактор Ланде является гиромангнитным отношением для полного магнитного и механического моментов атома. Если  $S = 0$  и  $J = L$ , то  $g_L = 1$ . Если  $L = 0$  и  $J = S$ , то  $g_L = 2$ . В общем случае фактор Ланде является рациональной дробью.

Классификация состояний атома производится по квантовому числу полного спина атома  $S$ , по квантовому числу полного орбитального момента атома  $L$  и по квантовому числу полного момента атома  $J$ . Орбитальный момент атома обозначается символами  $S, P, D, F, \dots$  в полной аналогии с одноэлектронными состояниями схеме указанной в таблице 11

Таблица 1

$L$	0	1	2	3	4	5	6	7
Состояние $\{L\}$	$S$	$P$	$D$	$F$	$G$	$H$	$I$	$K$

Полный момент атома  $J$  указывается индексом внизу справа у символа орбитального состояния атома: Полный спин характеризуется обусловленной им мультиплетностью термов, которая равна  $(2S + 1)$ . Число  $(2S + 1)$  ставится слева вверху у символа орбитального состояния. То есть состояние атома с квантовыми числами  $L, J, S$  запишется как  $^{(2S+1)}\{L\}_J$ . Например, символ  $^2S_{1/2}$  показывает, что у атома  $L = 0, J = 1/2, S = 1/2$ , символ  $^2D_{3/2}$  – что у атома  $L = 2, J = 3/2, S = 1/2$  и т.д. Такое написание состояний атома является общепринятым. Также, иногда перед обозначением состояния ставят главное квантовое число:  $n^{(2S+1)}\{L\}_J$ .

#### 6.4 Термы основных состояний атомов

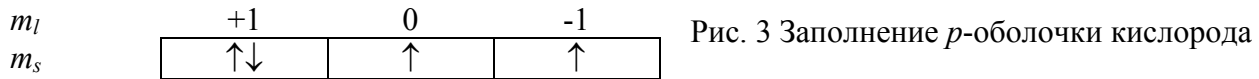
Заполненные оболочки имеют  $S = 0, L = 0$  и  $J = 0$ . Для электронов с одинаковыми  $n$  и  $l$  на незаполненной внешней оболочке эти квантовые числа определяются полуэмпирическими *правилами Хунда*:

1. Минимальной энергией данной электронной конфигурации обладает терм с наибольшим возможным значением спина  $S$  и с наибольшим возможным при таком  $S$  значении  $L$ .
2. При этом квантовое число

$$J = \begin{cases} |L - S|, & \text{оболочка заполнена менее, чем на половину;} \\ |L + S|, & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (49)$$

Применим эти правила к  $p$ -оболочке. В ней могут находиться  $2(2l + 1) = 6$  электронов. Возьмем, например, атом кислорода  $O$  с электронной конфигурацией  $1s^2 2s^2 2p^4$  ( $p$ -оболочка заполнена не полностью). Изобразим заполнение ячеек и запишем соответствующие значения квантовых чисел. Для  $p$ -оболочки это будет 3 ячейки со значениями  $m_l = -1, 0, +1$  (см. рис. 3).





Затем будем заполнять эти ячейки электронами. Электрон с  $m_s = +1/2$  изобразим стрелкой вверх «↑», а с  $m_s = -1/2$  – стрелкой вниз «↓». Начнем с «↑». Таких электронов может быть только три, так как имеется всего три ячейки, значит последний четвертый электрон будет иметь проекцию спина «↓». Его надо поместить в ячейку с *максимальным* значением  $m_l$ . Этим самым обеспечивается максимальность суммарных проекций:

$$m_s = \sum m_s = 3 \cdot \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 1, \quad (50)$$

$$m_L = \sum m_L = 2 \cdot (+1) + 1 \cdot 0 + 0 \cdot (-1) = 1. \quad (51)$$

Максимальные значения  $m_s$  и  $m_L$  равны  $S$  и  $L$ , т.е.  $S = 1$  и  $L = 1$ .

В данном случае оболочка заполнена более, чем наполовину, поэтому согласно второму правилу Хунда

$$J = L + S = 2. \quad (52)$$

Таким образом, основной терм данной конфигурации это  ${}^3P_2$ .

### 6.5 Мультиплетная структура термов атомов и линий излучения как результат спин-орбитального взаимодействия

При анализе спектров щелочных металлов с помощью спектроскопических приборов высокой разрешающей силы обнаруживается, что каждая из линий излучения в действительности расщеплена на две линии, т. е. является дублетом. Наличие расщепления у линий показывает, что энергия уровней от некоторой дополнительной величины, которая несколько изменяет энергию уровней. Таким образом, в физике впервые пришли к необходимости приписать электрону внутреннюю степень свободы – собственный механический момент импульса – спин и связанный с ним собственный магнитный момент.

Наличие магнитного момента у электрона позволяет объяснить дублетный характер спектров щелочных металлов, так как он дает дополнительное взаимодействие, которое называется *спин-орбитальным*. Оно обусловлено энергией взаимодействия магнитного момента  $\mathbf{M}$  с внешним магнитным полем, равной

$$E_{\text{МВ}} = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}, \quad (53)$$

где  $\mathbf{B}$  – индукция внешнего магнитного поля.

В чем заключается сущность спин-орбитального взаимодействия? Пусть вокруг ядра движется один электрон. Так как электрон движется в кулоновском поле ядра и никакого магнитного поля нет, то на первый взгляд не видно, из-за чего может появиться дополнительная энергия взаимодействия. Перейдем в систему координат, связанную с электроном, движущимся

вокруг ядра. В этой системе электрон покоится в начале координат, а ядро движется вокруг электрона. При своем движении положительно заряженное ядро создает в точке нахождения электрона магнитное поле  $\mathbf{B}_{\text{эф}}$ , которое приводит к появлению энергии взаимодействия. Поскольку магнитный момент может ориентироваться лишь двумя способами относительно направления  $\mathbf{B}_{\text{эф}}$ , энергия взаимодействия может принимать лишь два значения:

$$E_{\text{МВ}} = -\mathbf{M}_s \cdot \mathbf{B}_{\text{эф}} = \pm e\hbar B_{\text{эф}} / (2m). \quad (54)$$

Энергия спин-орбитального взаимодействия прибавляется или вычитается от энергии соответствующего уровня электрона. В результате этого каждый уровень расщепляется на два подуровня. Расщепление уровней энергии на подуровни, обусловленное спин-орбитальным взаимодействием, называется *тонкой структурой уровней*.

Выражение для термов одноэлектронного атома с учетом спин-орбитального взаимодействия дается *формулой Дирака*:

$$T_{nj} = \frac{RZ^2}{n^2} + \frac{\alpha^2 RZ^4}{n^3} \left( \frac{2}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right), \quad (55)$$

где  $Z$  – зарядовое число ядра,  $R$  – постоянная Ридберга,  $n$  – главное квантовое число,  $j$  – квантовое число полного момента электрона,  $\alpha = 2\pi e^2 / (hc) \cong 1/137$  – постоянная тонкой структуры (формула для  $\alpha$  дана в СГС). В зависимости от того, в каких единицах записана постоянная Ридберга, формула (55) дает выражение для термов в энергетических единицах, единицах обратных длин волн, в единицах частоты. Например, если  $R = E_0 = 13,6$  эВ, тогда  $E_{nj} = -T_{nj}$  – уровни энергии одноэлектронного атома.

Тонкая структура энергетических уровней полностью объясняет особенности спектра излучения щелочных металлов.

Все вышеприведенное можно обобщить на случай более сложных атомов. В случае  $(L, S)$ -связи все спины электронов связываются между собой и образуют суммарный спин атома  $\mathbf{L}_S$ , а все орбитальные моменты атомов связываются между собой и образуют суммарный орбитальный момент атома  $\mathbf{L}_L$ . Таким образом, полный спиновой магнитный момент атома взаимодействует с орбитальным движением всех электронов атома, описываемым полным орбитальным моментом атома, т.е. в атоме имеется *спин-орбитальное взаимодействие*.

Число взаимных ориентировок  $\mathbf{L}_L$  и  $\mathbf{L}_S$  дается формулой (42):  $N_{LS} = 2 \min(L, S) + 1$ . Каждая взаимная ориентировка  $\mathbf{L}_L$  и  $\mathbf{L}_S$  дает свою энергию взаимодействия, которая и обуславливает расщепление соответствующего энергетического уровня атома на подуровни, т.е. *мультиплетную структуру термов атома*. Каждому подуровню соответствует свое значение квантового числа полного момента атома  $J$ , так как именно  $J$  определяет взаимную ориентировку  $\mathbf{L}_L$  и  $\mathbf{L}_S$ . Мультиплетность линий излучения порождается мультиплетностью энергетических

уровней атома. Сложная линия, состоящая из нескольких компонент – мультиплет. Число компонент в мультиплете может быть равно двум (дублет), трем (триплет), четырем (квартет), пяти (квинтет) и т.д.

Не все переходы между уровнями разрешены. Существуют *правила отбора квантовых чисел* для оптических переходов. Для суммарного орбитального момента правила отбора записываются следующим образом:

$$\Delta L = \pm 1; \quad (56)$$

то есть при переходе электрона с одного энергетического уровня на другой, полный момент атома может изменяться лишь на  $\pm 1$ . Иногда встречаются переходы с  $\Delta L = 0$ , но этот случай очень редок.

Правило отбора для полного спина записывается как

$$\Delta S = 0. \quad (57)$$

Правило отбора для  $J$  получается в результате комбинации правил (56) и (57):

$$\Delta J = 0, \pm 1; \quad (58)$$

причем переход из состояния  $J = 0$  в состояние  $J = 0$  невозможен.

В качестве примера рассмотрим переход из состояния  ${}^3D$  в  ${}^3P$  в спектре орто-гелия. В орто-гелии спины двух электронов направлены в одном направлении, следовательно, суммарное спиновое число  $S = 1$ .

В состоянии  ${}^3D$  квантовые числа  $L_1 = 2$ ,  $S_1 = 1$ , следовательно, квантовое число полного момента может принимать значения:

$$J_1 = |L_1 - S_1|, \dots, (L_1 + S_1) = 1, 2, 3.$$

В состоянии  ${}^3P$  квантовые числа  $L_2 = 1$ ,  $S_2 = 1$ , следовательно, квантовое число полного момента может принимать значения:

$$J_2 = |L_2 - S_2|, \dots, (L_2 + S_2) = 0, 1, 2.$$

Согласно правилам отбора возможны следующие переходы:

$$J_1 = 1 \rightarrow J_2 = 2, \quad J_1 = 2 \rightarrow J_2 = 2, \quad J_1 = 3 \rightarrow J_2 = 2, \\ J_1 = 1 \rightarrow J_2 = 1, \quad J_1 = 2 \rightarrow J_2 = 1, \quad J_1 = 1 \rightarrow J_2 = 0.$$

Всего 6 переходов. Схема переходов показана на рис. 4.

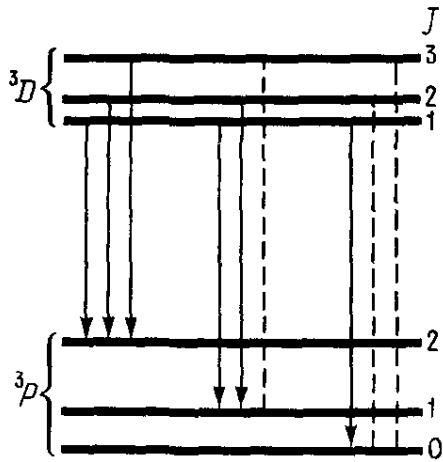


Рис. 4 Схема переходов из  ${}^3D$  в  ${}^3P$

Таким образом, излучается шесть линий. Эти линии группируются в три группы: в первой – одна линия, во второй – две близко расположенные линии и в третьей – три близко расположенные линии. В целом эти группы линий воспринимаются как триплет. Лишь при более сильном разрешении видны шесть линий, называемые *сложным триплетом*, поскольку они образованы в результате переходов между триплетными уровнями.

Отметим, что в связи с существованием спина электрона естественно возникает вопрос о том, что и у водородного атома уровни с  $l > 0$  должны быть двойными, а спектральные линии – дублетными. Тонкая структура водородного спектра действительно была обнаружена экспериментально.