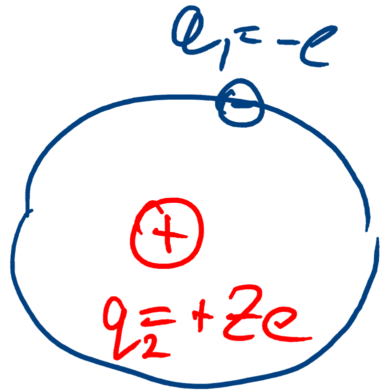
Глава 14. Стационарные состояния одноэлектронных атомов

14.1. Четыре приближения в физике атома

1) Первое эл. стат. приближение

$$\hat{U} = -\frac{kZe^2}{r}$$



Учитывается только эл. стат. вз-е 1-го эл-на и ядра.

Справедливо только для 1-эл. атомов $H, D, T, He^+, \dots$

2) Второе эл. стат. приближение

. Описание многоэл. атомов

$$\hat{U} = -\sum_{n=1}^{Z} \frac{kZe^2}{r_n} + \frac{1}{2}\sum_{n,m=1}^{Z} \frac{ke^2}{r_{mn}}; \quad r_{mn} = |\vec{r}_n - \vec{r}_m|^2$$

р-е от $n^{го}$ эл-на до ядра

р-е м/у n-м и m-м эл-нами.

3) Первое электромагнитное прибл-е

Учитывается вз-е магн. моментов эл-нов различной природы: спин, орб. мом.

4) Второе э/м прибл-е. Описание атома во внешнем магн. поле.

14.2. Одноэл. атомы

Рассм. атом в 1м эл. стат. прибл-и и найдем его термы и орбитали в стац. сост.

1) Сф. СК. Нач. коорд. – связано с ядром.

2) $\hat{U} = -k\frac{Ze^2}{r}$;

3) $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$; $\quad T = \underbrace{T_r}_{\text{рад. движ.}} + \underbrace{T_{\theta,\varphi}}_{\text{вр. движ.}}$

$T_r = \dfrac{p_r^2}{2\mu}$; $\quad T_{\theta,\varphi} = \dfrac{L^2}{2\mu r^2}$

$$\Rightarrow \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} - k\frac{Ze^2}{r}$$

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta$$

$$\hat{p}_r = -\hbar^2 \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta,\varphi} = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

4) Стац УШ ; $\hat{H}\psi = E\psi$

$$\left(\frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} - \frac{kZe^2}{r}\right)\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi)$$

$$\underbrace{+\hat{L}^2}_{\theta,\varphi}\psi = \underbrace{-2\mu r^2\left(\frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} - \frac{kZe^2}{r} - E\right)}_{r}\psi$$

Разделим переменные $\psi(r,\theta,\varphi) = \underbrace{R(r)}_{\text{радиальна ф-я}}\,\underbrace{Y(\theta,\varphi)}_{\text{сферич. ф-я.}}$

$$\Rightarrow R\hat{L}^2 Y = -Y\,2\mu r^2\left(\frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} - \frac{kZe^2}{r} - E\right)R$$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{\hat{L}^2 Y}{Y}}_{\theta,\varphi} = \underbrace{-\frac{2\mu r^2\left(\frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} - \frac{kZe^2}{r} - E\right)\cdot R}{R}}_{r} = \text{const} = \underline{\lambda^2\hbar^2}$$

$$
\begin{cases}
\hat{L}^2 Y = \hbar^2 \lambda^2 Y \\
\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r}\right) + \\
+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + \frac{kZe^2}{r}\right) - \right. \\
\left. - \frac{\lambda^2}{r^2}\right] R = 0
\end{cases}
$$

$$2\mu r^2\left(\frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} - \frac{kZe^2}{r} - E\right)R + \hbar^2\lambda^2 R = 0$$

$$-\hbar^2 \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r}\right) - 2\mu\left(\frac{kZe^2}{r} + E\right)R +$$

$$+ \frac{\lambda^2 R \hbar^2}{r^2} = 0$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r}\right) + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + \frac{kZe^2}{r}\right) - \frac{\lambda^2}{r^2}\right]R =$$

$$= 0$$

14.3. Собственные значения и ф-и оператора квадрата орб. момента

$\hat{L}^2$ — оператор квадрата орб. момента (момента импульса)

$$-\cancel{\hbar^2}\Bigg(\underbrace{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)}_{\theta}+\underbrace{\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}}_{\varphi}\Bigg)Y=\cancel{\hbar^2}\lambda^2 Y$$

Разделяем переменные: $Y(\theta,\varphi)=\Phi(\varphi)\,\Theta(\theta)$

$$\Rightarrow \quad \frac{\Phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) + \frac{\Theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} = -\lambda^2\Theta\Phi$$

$$\frac{\sin^2\theta}{\Theta\Phi}; \quad \underbrace{\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) + \lambda^2\sin^2\theta}_{\theta} = \underbrace{-\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}}_{\varphi} =$$

$$= \text{const} = \mu^2$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) + \left(\lambda^2 - \frac{\mu^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta = 0 \\ \frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} + \mu^2\Phi = 0 \end{cases}$$

Рассм. ур-е $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + \mu^2 \Phi = 0$.

Рассм. оператор $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + \mu^2 \Phi = \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \mu^2 \right) \Phi = \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - (i\mu)^2 \right) \Phi =$$

$$= \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i\mu \right) \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} + i\mu \right) \Phi = \frac{1}{(-i\hbar)^2} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} - \hbar\mu \right) \times$$

$$\times \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} + \hbar\mu \right) \Phi = -\frac{1}{\hbar^2} \left(\hat{L}_z - \mu\hbar \right) \left(\hat{L}_z + \mu\hbar \right) \Phi = 0$$

$\Rightarrow \Phi$ реш-е 1го из 2х ур-ий:

$\hat{L}_z \Phi = +\mu\hbar\Phi$; $\hat{L}_z \Phi = -\mu\hbar\Phi$;

В явном виде: $-i\cancel{\hbar}\dfrac{\partial\Phi}{\partial\varphi} = \pm\mu\cancel{\hbar}\Phi$

$\Rightarrow \dfrac{d\Phi}{\Phi} = \pm i\mu\, d\varphi \Rightarrow \ln\Phi = \pm i\mu\cdot\varphi + \ln\Phi_0$

$\Rightarrow \boxed{\Phi = \Phi_0 e^{\pm i\mu\varphi}}$

Требование однозначности влечет:

$$\Phi(\varphi) = \underline{\Phi(\varphi + 2\pi)}.$$

$$\Rightarrow \Phi_0 e^{\pm i\mu\varphi} = \Phi_0 e^{\pm i\mu\varphi \pm i\mu\cdot 2\pi}$$

$$\Rightarrow \underline{e^{\pm i\mu\cdot 2\pi} = \underline{1}} = \cos(2\pi\mu) \pm i\sin(2\pi\mu) = \underline{1}$$

$$\Rightarrow \underline{\mu \in \mathbb{Z}}.$$ ($\pm$ учитывается).

$\mu = m_e \in \mathbb{Z}$. — Из усл-я нормировки

$$\int_0^{2\pi} |\Phi|^2 d\varphi = 1 \Rightarrow \int_0^{2\pi} \Phi_0^2 e^{-im_e\varphi} e^{im_e\varphi} d\varphi = 1$$

$$\Rightarrow \Phi_0^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi \Phi_0^2 = 1$$

$$\Rightarrow \Phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\boxed{\Phi_{m_e} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_e\varphi}}$$

Φ_{m_ℓ} — соб. ф-я оператора проекции орб. мом. $\hat{L}_z$ с соб. числом L_z

$$\hat{L}_z \Phi_{m_\ell} = L_z \Phi_{m_\ell} \Rightarrow \boxed{L_z = m_\ell \hbar}$$

соб. числа оператора проекции орб. мом.

Рассм. ур-е: $\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\left(\lambda^2-\frac{m_e^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta=0$

Замена: $\xi=\cos\theta$ $\quad \frac{\partial f}{\partial\theta}=\frac{\partial f}{\partial\xi}\frac{\partial\xi}{\partial\theta}=-\frac{\partial f}{\partial\xi}\sin\theta$

$\Theta(\theta)=P(\cos\theta)=P(\xi)$

$$\Rightarrow \frac{1}{\cancel{\sin\theta}}(-\cancel{\sin\theta})\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\sin\theta(-\sin\theta)\frac{\partial P}{\partial\xi}\right)+\left(\lambda^2-\frac{m_e^2}{1-\xi^2}\right)P=0$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial\xi}\left((1-\xi^2)\frac{\partial P}{\partial\xi}\right)+\left(\lambda^2-\frac{m_e^2}{1-\xi^2}\right)P=0$$

$$\boxed{\frac{d}{d\xi}\left[(1-\xi^2)\frac{dP}{d\xi}\right]+\left[\lambda^2+\frac{m_e^2}{1-\xi^2}\right]P=0}$$

ур-е для присоединенных ф-и Лежандра

Чтобы ф-я P была непр. и конечной при всех знач-ях θ, необх. чтобы:) из усл для волн. ф-и

$$\lambda^2=l(l+1), \quad l=0,1,2,\ldots$$

$$m_e=-l,-l+1,\ldots,0,\ldots,l-1,l$$

l - орбитальное кв. число

m_e - магнитное (орб.) кв. число

В этом случае реш-е ур-я:

$$P_l^{m_l} = \frac{1}{2^l l!}(1-\xi^2)^{m_l/2}\frac{d^{l+m_l}}{d\xi^{l+m_l}}(\xi^2+1)^l$$

Т.о. соб. ф-и оператора $\hat{L}^2$ —

сферические ф-и: $Y_l^{m_l}(\theta,\varphi) = C_l^{m_l} e^{im_l\varphi} P_l^{m_l}(\cos\theta)$

Соб. числа: $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$ $\Rightarrow$ $L_l = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ — знач. орб. мом.

$$\hat{L}^2 Y_l^{m_l} = \hbar^2 l(l+1) Y_l^{m_l}$$

Из усл. норм-ки: $$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \, |Y_l^{m}(\theta,\varphi)|^2 = 1$$

$$\Rightarrow \quad C_l^{m} = \left(\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right)^{1/2}$$

Сост. с различн. l принято обозначать буквами:

l	0	1	2	3	4	5	6	7
обозн. орбитали	s	p	d	f	g	h	i	k

Сост.	l	m_l	$P_l^{m_l}(\cos\theta)$
s	0	0	1
p	1	0	$\cos\theta$
	1	± 1	$\pm\sin\theta$
d	2	0	$3\cos^2\theta - 1$
	2	± 1	$\pm\sin\theta\cos\theta$
	2	± 2	$\sin^2\theta$

$\underline{|\Psi|^2 = \frac{dP}{dV}}$ => зависимость плотн. вер-сти обнаружить частицу в точке в завис. от угла

опр-ся $\underline{|Y_l^{m_l}|} = \text{Const}\,\underline{|P_l^{m_l}|}$.

– зависит только $\underline{\text{от } \theta}$. => распр-е плотн. вер-сти – – аксиально-симметрично.

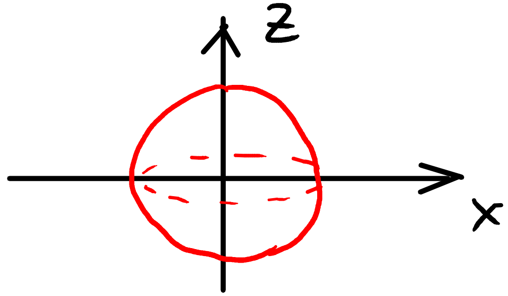
Полярная диаграмма; зависимость $z = |P_l^{m_l}|$ от угла $\underline{\theta}$.

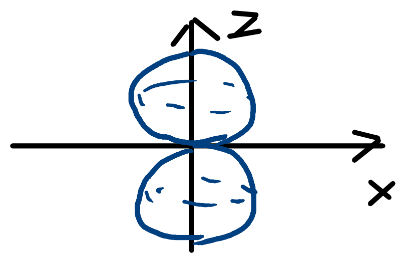
s-сост. $l=0$; $m_l=0$;

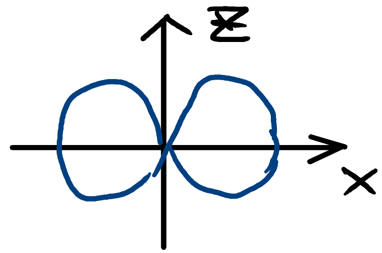
p-сост $l=\underline{1}$

$m=0$

$m=\pm 1$

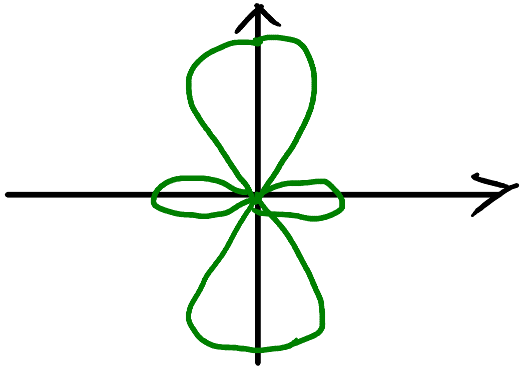




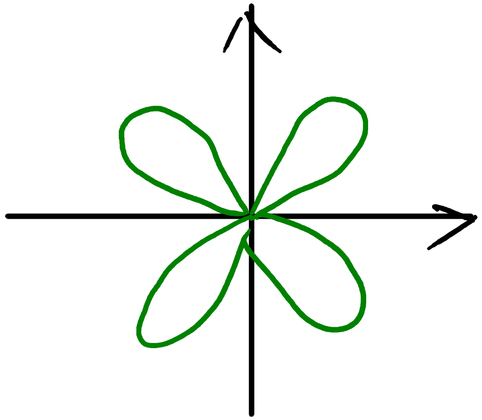


d-орб. $l=2$;

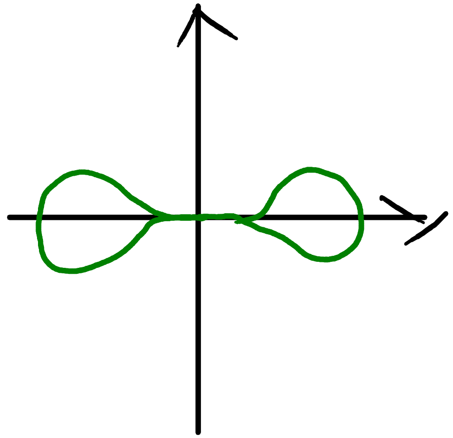
$m_l = 0$



$m_l = \pm 1$



$m_l = \pm 2$



14.4. Радиальное расп-е электронной плотности и термы одноэл. атомов

Ур-е на радиальную часть волн. ф-и

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E+\frac{kZe^2}{r}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)R=0$$

Обознач. : $A=-\frac{2\mu E}{\hbar^2}$; $2B=\frac{2\mu kZe^2}{\hbar^2}$;

$\rho=2\sqrt{A}\cdot r$ $\Rightarrow$ $r=\frac{\rho}{2\sqrt{A}}$;

$R=R(\rho)$

$$\frac{\partial f}{\partial r}=\frac{\partial f}{\partial \rho}\frac{\partial \rho}{\partial r}=2\sqrt{A}\,\frac{\partial f}{\partial \rho}$$

$$\cancel{\frac{4A}{\rho^2}}\, 2\sqrt{A}\,\frac{d}{d\rho}\left(\frac{\rho^2}{\cancel{4A}}\cdot 2\sqrt{A}\cdot R'\right)+\left(-A+\frac{2B}{\rho}2\sqrt{A}-\right.$$

$$\left.-\frac{4A}{\rho^2}\,l(l+1)\right)R=0 \quad \Big|\cdot\frac{1}{4A}$$

$$\frac{1}{\rho^2}\left(\rho^2R'\right)'+\left(-\frac{1}{4}+\frac{B}{\sqrt{A}}\frac{1}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)R=0$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\rho^2}\left(\rho^2R''+2\rho R'\right)+\left(-\frac{1}{4}+\frac{B}{\sqrt{A}\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)R=0$$

$$R'' + \frac{2}{\rho} R' + \left(-\frac{1}{4} + \frac{B}{\sqrt{A}} \cdot \frac{1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) R = 0$$

Найдем асимпт. реш-е при $\rho \to \infty$.

$\Rightarrow$ члены с $\frac{1}{\rho}$ и $\frac{1}{\rho^2}$ $\simeq 0$ при $\rho \to \infty$

$\Rightarrow$ $R'' - \frac{1}{4} R = 0$. Общ. реш-е: $R = K_1 e^{-\rho/2} + K_2 e^{\rho/2}$.

Т.к. R - часть в.ф. и должна быть конечна, то $K_2 = 0$.

При $\rho \to \infty$: $R = K_1 e^{-\rho/2}$.

При $\rho \to 0$ главные члены — с макс. ст. ρ в знаменателе:

$$R'' + \frac{2}{\rho} R' - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R = 0.$$

Ищем реш-е в виде: $R = \beta \rho^{\gamma}$

$$\Rightarrow \cancel{\beta} \cdot \gamma(\gamma-1) \rho^{\cancel{\gamma-2}} + \frac{2}{\cancel{\rho}} \cancel{\beta} \cdot \gamma \cancel{\rho}^{\gamma-1} - \frac{l(l+1)}{\cancel{\rho^2}} \cancel{\beta} \cancel{\rho}^{\gamma} = 0$$

$$\Rightarrow \gamma(\gamma-1) + 2\gamma - l(l+1) = 0$$

$$\gamma^2 + \gamma - l(l+1) = 0;$$

$$x^2 + px + q = 0$$

$$x_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q}$$

$$\gamma_{1,2} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + \ell(\ell+1)} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\ell^2 + \ell + \frac{1}{4}} =$$

$$= -\frac{1}{2} \pm \left(\ell + \frac{1}{2}\right); \qquad \gamma = \begin{cases} \ell, \\ -\ell-1; \end{cases}$$

Реш-е с $\gamma = -\ell-1$: $\underline{R = \beta\rho^{-\ell-1}}$. $\xrightarrow[\rho \to 0]{} \infty$

$\Rightarrow$ не <u>годится</u>.

Т.о. при $\rho \to 0$; $\underline{R = \beta\rho^{\ell}}$.

T.O.

$$R = e^{-\rho/2}\rho^{l} \cdot v(\rho)$$

→ b ype :

$$R' = -\frac{1}{2}e^{-\rho/2}\rho^{l}v + l\rho^{l-1}e^{-\rho/2}v + e^{-\rho/2}\rho^{l}v'$$

$$R'' = +\frac{1}{4}e^{-\rho/2}\rho^{l}v - \frac{1}{2}l\rho^{l-1}e^{-\rho/2}v - \frac{1}{2}e^{-\rho/2}\rho^{l}v' + l(l-1)\rho^{l-2}e^{-\rho/2}v - \frac{1}{2}l\rho^{l-1}e^{-\rho/2}v + l\rho^{l-1}e^{-\rho/2}v' - \frac{1}{2}e^{-\rho/2}\rho^{l}v' + l\rho^{l-1}e^{-\rho/2}v' + e^{-\rho/2}\rho^{l}v''$$

4 $(a+b+c)^2 = a^2+b^2+c^2+2ab+2ac+2bc$

$$\frac{1}{4}\cancel{e^{-\rho/2}}\rho^{l} v - l\rho^{l-1}\cancel{e^{-\rho/2}} v - \cancel{e^{-\rho/2}}\rho^{l} v' + l(l-1)\rho^{l-2}\cancel{e^{-\rho/2}} v +$$

$$+ 2l\rho^{l-1}\cancel{e^{-\rho/2}} v' + \cancel{e^{-\rho/2}}\rho^{l} v'' + \frac{2}{\rho}\left(-\frac{1}{2}\cancel{e^{-\rho/2}}\rho^{l} v + \right.$$

$$\left. + l\rho^{l-1}\cancel{e^{-\rho/2}} v + \cancel{e^{-\rho/2}}\rho^{l} v'\right) +$$

$$+ \left(-\frac{1}{4} + \frac{B}{\sqrt{A}\,\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\cancel{e^{-\rho/2}}\rho^{l} v = 0$$

$$\frac{1}{\rho^{l-1}} \Big| \; v''(\rho^{l}) + v'(-\rho^{l} + 2l\rho^{l-1} + 2\rho^{l-1}) +$$

$$+ v\left(\cancel{\tfrac{1}{4}\rho^{l}} - l\rho^{l-1} + \cancel{l(l-1)\rho^{l-2}} - \rho^{l-1} + \cancel{2l\rho^{l-2}} - \right.$$

$$\left. - \cancel{\tfrac{1}{4}}\rho^{l} + \frac{B}{\sqrt{A}}\rho^{l-1} - \cancel{l(l+1)\rho^{l-2}}\right) = 0$$

$$l^2 - l + \\ + 2l - \\ - l^2 - l = 0$$

$$\rho v'' + (2(l+1) - \rho) v' + \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1\right) v = 0 \quad (*)$$

Если v представить в виде степ. ряда, то из требования конечности в обл. опр-я вытекает услов-е:

$$\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1 - k = 0; \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

$$\Rightarrow \frac{\mu k z e^2}{\hbar^2 \sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}} = l + k + 1 = n; \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$\Rightarrow \frac{\mu^2 k^2 z^2 e^4}{\hbar^2 (-2\mu E)} = n^2$$

$$\Rightarrow \boxed{E_n = -\frac{\mu k^2 Z^2 e^4}{2\hbar^2 \cdot n^2}}$$

Термы одноэл. атомов

$n = 1, 2, 3, 4 \ldots$ — гл. кв. число

$\underline{n = k + l + 1}$; при данном n: $k + l = \underline{n-1}$, $k = \underline{0, 1, 2} \ldots$

$$\underline{l = 0, 1, \ldots, n-1}$$

орб. кв. число.

Реш-е ур-е (x) — полиномы Лагерра:

$$\nu = Q_k^{2l+1} = Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho); \quad \Big| \; Q_s^q = e^{\rho}\rho^{-q}\frac{d^s}{d\rho^s}\left(e^{-\rho}\rho^{q+s}\right)$$

Т.о. $R_{nl} = N_{nl}\, e^{-\rho/2} \rho^{l} Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$

рад. часть. волн. ф-ц

$\psi_{nlm_l} = R_{nl}(r)\, Y_l^{m_l}(\theta, \varphi)$ | орбиталь стац. сост. одноэл. атома

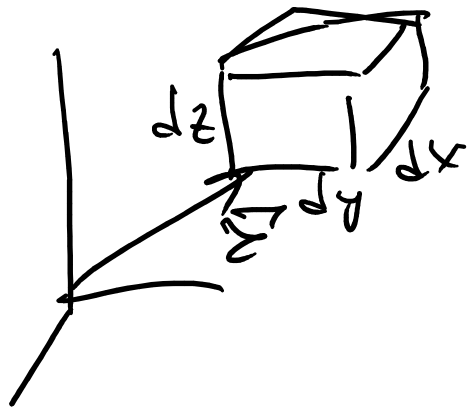
В осн. сост. $1s$ $(n=1;\ l=0;\ m_l=0)$

$\psi_{1s} = R_{10} Y_0^0 = C_{1s} \cdot e^{-r/a_B}$;

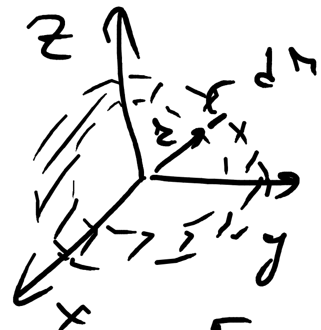
$C_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}}$

Плотн. вер-сти $\frac{dP}{dV} = |\psi|^2$.

$$\Rightarrow dP = |\psi|^2 dV = |\psi|^2 dx\,dy\,dz$$



Рассм. вер-сть обнаружить частицу в интервале $r \div r+dr$.



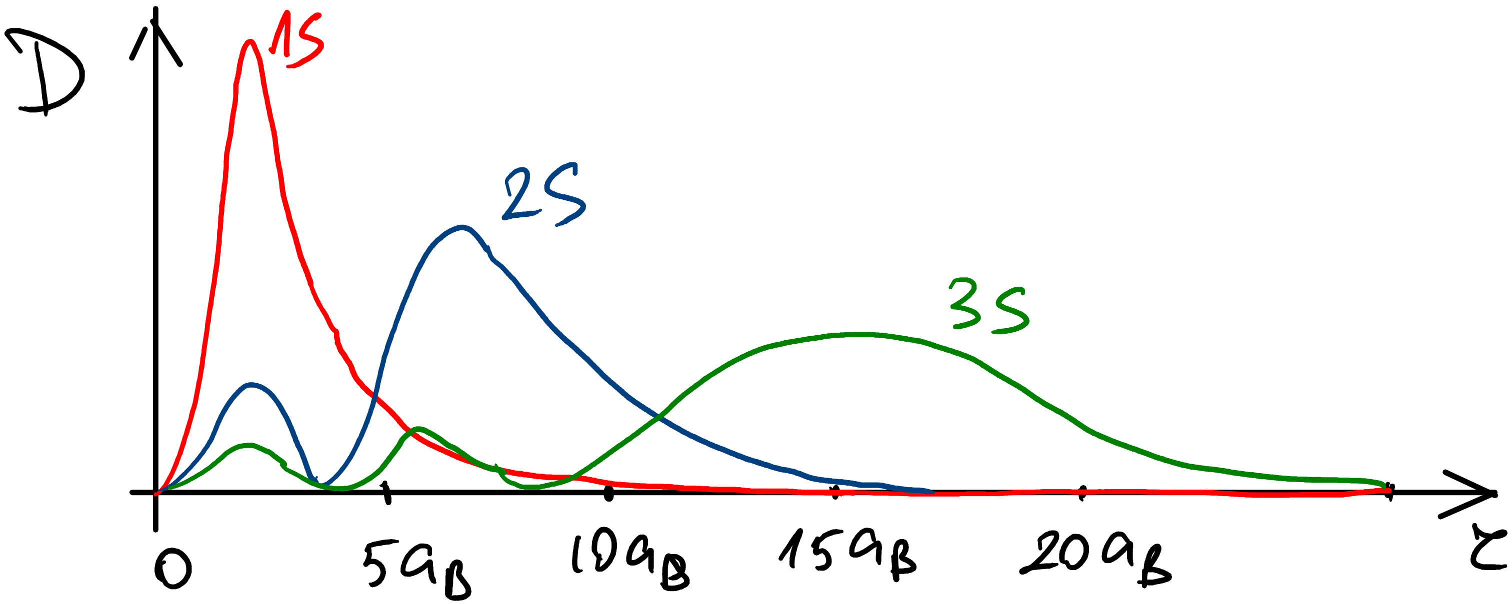
В сф. СК. $dP = |\psi|^2 r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi$

проинт. по θ и φ:

$$\Rightarrow dP_r = \int_{угл} dP = |\psi|^2 r^2 \left(\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\right)$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{D = \frac{dP_r}{dr} = 4\pi r^2 |\psi|^2}$$

плотн. вер-ся обнаружить частицу на р-ии r.



Энергия E_n опр-ся 1м кв. числом. — n

Орбиталь (в.ф.) зависит. от 3^x кв. чисел — n, l, m_l,

(если учесть спин, то от 4^x — n, l, m_l, m_s)

$m_s = \pm 1/2$

Явл-е, кот. сост. в том, что для одного знач. энергии $\exists$ несколько различн. сост. с этой энергией, наз-ся вырождение термов

Число сост. (орбиталей) с одинаковой энергией — — кратность вырождения

Для одноэл. атома, с энергией, опр. числом

$\underline{n}$ кратность вырождения:

$l = \overline{0, n-1}$; $m_l = \overline{-l, l}$; $m_s = \pm\frac{1}{2}$;

$$\sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m_l=-l}^{l} 2 = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1)\cdot 2 =$$

$$= \frac{n}{2} 2\cdot\left(2(n-1)+1\right) = n \cdot 2n = 2n^2$$