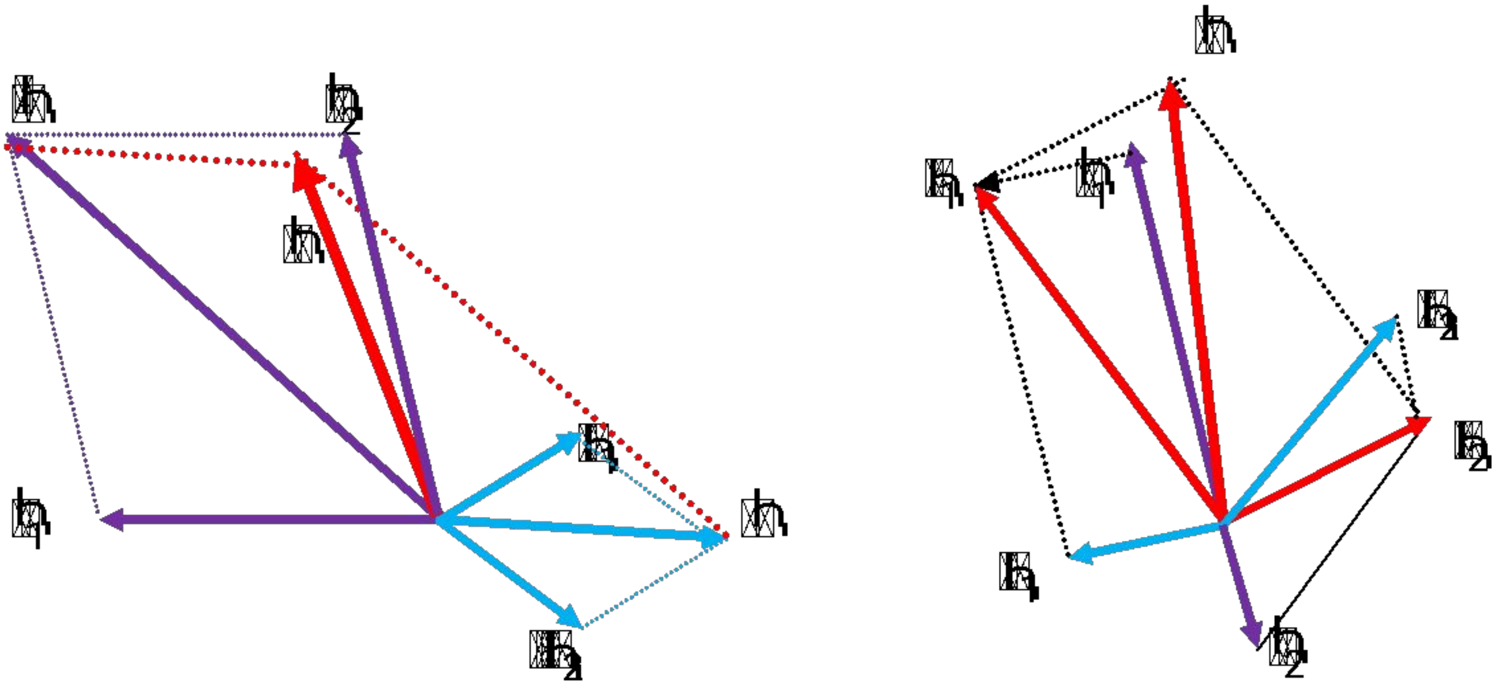
Атомная физика

ЛЕКЦИЯ 4.
Квантование момента импульса атома.
Момент импульса многоэлектронных атомов.

Результирующий момент импульса атома равен сумме моментов электронов, входящих в состав атома. Однако, прежде всего необходимо уяснить вопрос о порядке комбинации векторов: складываются ли сначала вектора и для каждого электрона = + а уже получившиеся после этого складываются и дают полный вектор = σ или наоборот – сначала складываются и для различных электронов = σ и = σ , а затем получившиеся векторы и складываются и дают полный вектор = + .

Порядок суммирования определяется характером связей: какая связь прочнее – связь спинов между собой и орбитальных моментов между собой, или наоборот, спин-орбитальная связь для каждого электрона.

На рис.4.1 приведены оба варианта связи; они дают одинаковое число возможных состояний, однако сами состояния будут различными.



LS – связь　　　　　*jj*- связь

Рис.4.1

Эти два вида взаимодействий образуют *LS* – связь и *jj*- связь.

jj – связь

Сначала взаимодействуют орбитальный и спиновый момент каждого электрона; образуются результирующие моменты электронов, затем уже суммируются моменты. Этот тип взаимодействия называется ***jj* – связью**.

Спин-орбитальная *LS* – связь

Орбитальные моменты электронов, взаимодействуя между собой, дают общий орбитальный момент $= \sigma$, в свою очередь, собственные моменты дают при взаимодействии общий спиновый момент $= \sigma$. Затем происходит взаимодействие и и образуется полный момент атома $=$ $+$. Этот тип взаимодействия называется ***LS* – связью** или **связью Рассель-Саундерса**; эта связь является наиболее распространенной.

Модуль суммарного орбитального момента электронов определяется квантовым числом L:

[illegible] (4.1)

Возможные значения L отличаются на целые числа. Для атома, состоящего из двух электронов с орбитальными квантовыми числами l_1 и l_2:

[illegible].

В атомах, состоящих из большего числа электронов, сначала находится сумма для двух электронов, затем этот результат суммируется с третьим электроном и т.д. Максимальное значение L будет равно сумме всех значений l_i.

Проекции [illegible] на выделенное направление определяется выражением:

[illegible] (4.2)

[illegible].

Результирующий спиновый момент:

$$L_S = \hbar\sqrt{S(S+1)} \qquad (4.3)$$

При четном числе N электронов S принимает все целые значения от $N/2$ до **0**, при нечетном - от $N/2$ до **1/2**. Например, при $N = 7$ возможные значения числа S: **7/2, 5/2, 3/2, 1/2**. На рис.4.2 представлены схемы ориентации спинов семи электронов.

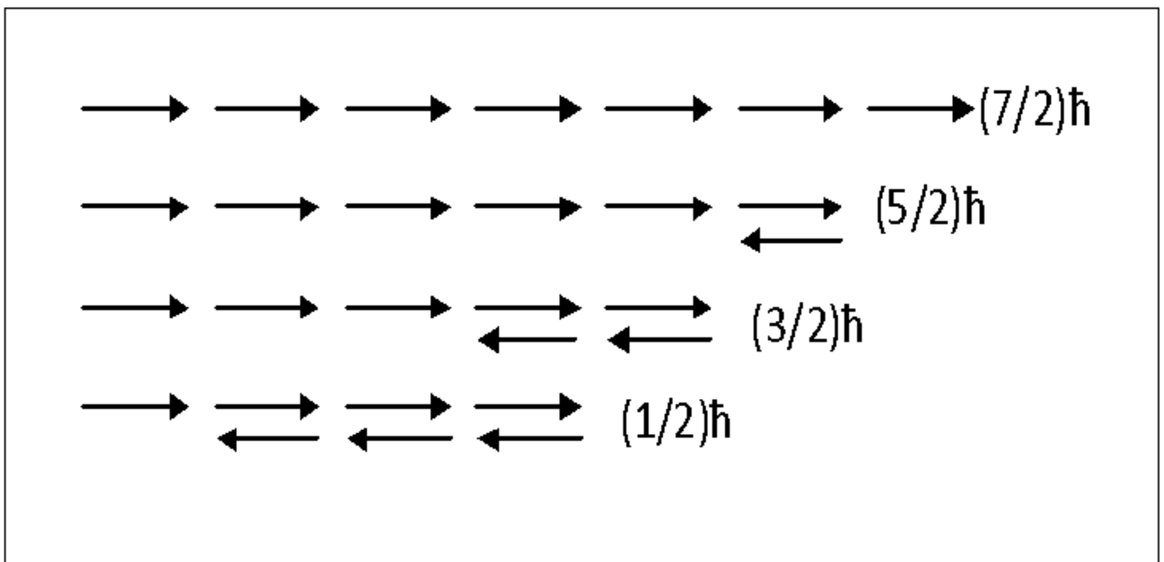


Рис. 4.2

Результирующий момент всего атома (при ***LS*-связи**) определяется квантовым числом ***J***:

$$[illegible] \tag{4.4}$$

Квантовое число *J* может иметь следующие значения:

$$J = (L+S), (L+S-1), \ldots, |L-S|,$$

Число ***J*** имеет целые значения, если ***S*** - целое число, или полуцелые, если ***S***-полуцелое число.

Энергия атома зависит от взаимной ориентации орбитальных моментов [illegible] (т.е. от квантового числа ***L***), от взаимной ориентации [illegible] (т.е. от квантового числа **S**) и от взаимной ориентации [illegible] и [illegible] (т.е. от квантового числа ***J***).

Рассмотрим случай атома с двумя электронами. Для него **L** примет значения:

$$L = l_1 + l_2;\ l_1 + l_2 - 1;\ l_1 + l_2 - 2; \ldots\ldots |l_1 - l_2| \qquad (4.5)$$

Полагаем, что $l_1 + l_2$. Пусть, например, $l_1 = 3$, а $l_2 = 2$.

При этом $[illegible] = \frac{[illegible]}{[illegible]\pi}\,\xi\,\overline{[illegible]}$ и $[illegible] = \frac{[illegible]}{[illegible]\pi}\,\xi\,\overline{[illegible]}$

Согласно (4.5) возможные значения квантового числа L будут равны: **5, 4, 3, 2, 1**.

Отсюда, возможные численные значения вектора суммарного орбитального момента [illegible] будут равны:

$$|[illegible]| = \frac{[illegible]}{[illegible]\pi}\,\xi\,\overline{[illegible]};\quad \frac{[illegible]}{[illegible]\pi}\,\xi\,\overline{[illegible]};\quad \frac{[illegible]}{[illegible]\pi}\,\xi\,\overline{[illegible]};\quad \frac{[illegible]}{[illegible]\pi}\,\xi\,\overline{[illegible]};\quad \frac{[illegible]}{[illegible]\pi}\,\xi\,\overline{[illegible]}.$$

С помощью простого графического метода можно получить представление о взаимном расположении векторов [illegible] и [illegible].

Для этого на оси **OX** отложим возможные значения суммарного орбитального момента в единицах $\frac{[illegible]}{[illegible]\pi}$,

т.е. $\xi\,\overline{[illegible]}$; $\xi\,\overline{[illegible]}$; $\xi\,\overline{[illegible]}$; $\xi\,\overline{[illegible]}$; $\xi\,\overline{[illegible]}$

и проведем из начала координат дуги с этими радиусами.

Вдоль оси **OY** отложим вектор [illegible] $= \frac{[illegible]}{[illegible]\pi}\xi\,\overline{[illegible]}$ в тех же единицах $\frac{[illegible]}{[illegible]\pi}$. Из точки **A** с координатами **(0,** $\xi\,\overline{[illegible]}$**)** проведем дугу радиусом [illegible] $= \frac{[illegible]}{[illegible]\pi}\xi\,\overline{[illegible]}$ (в единицах $\frac{[illegible]}{[illegible]\pi}$). Теперь радиус-векторы, проведенные из начал координат к точкам пересечения полуокружности с системой дуг, т.е. к точкам **D, C, D, E, F** представляют все возможные в данном случае векторы суммы [illegible] = [illegible] + [illegible]. На рис.4.2 приведены только два возможных направления вектора [illegible].

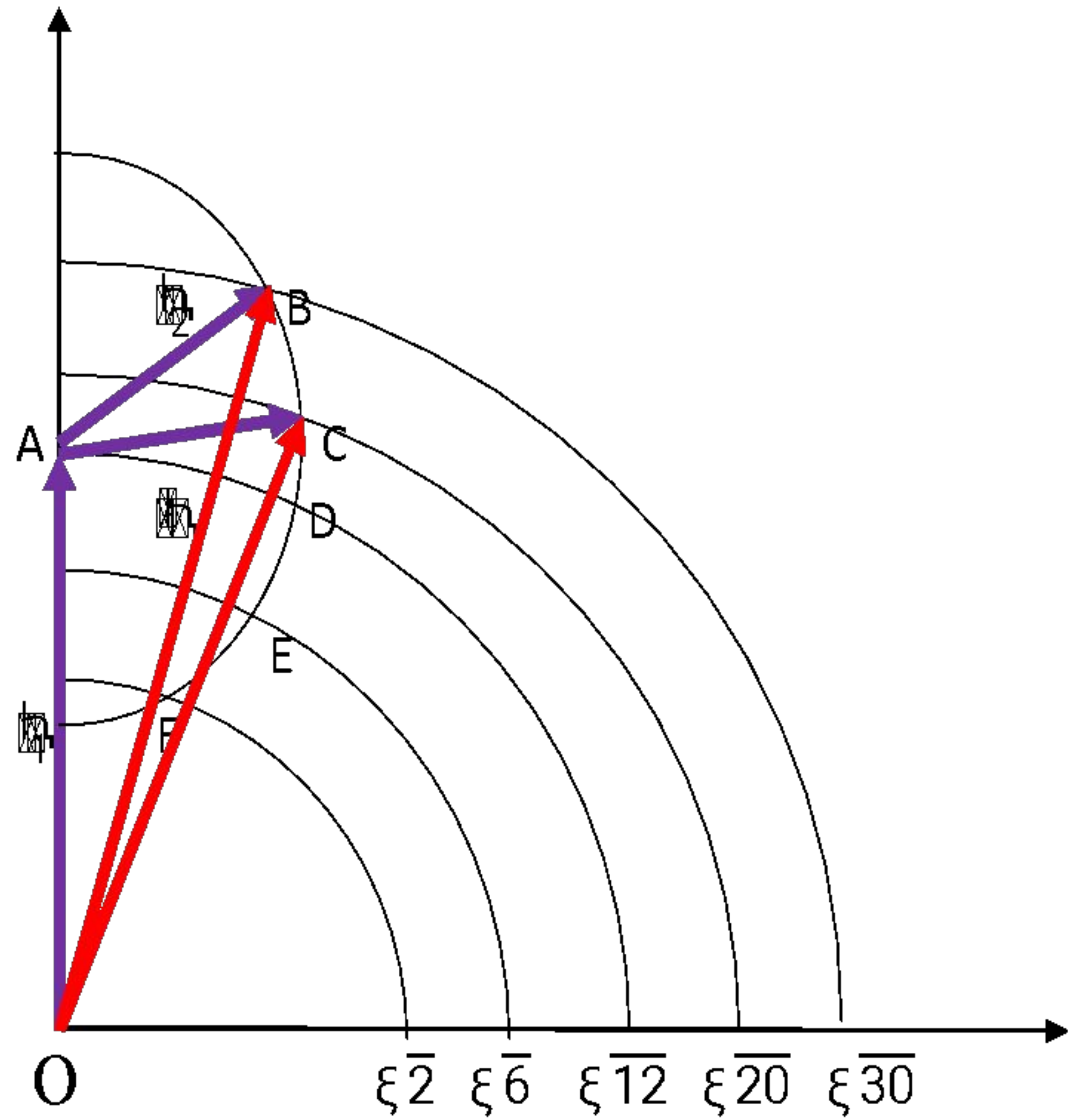


Рис.4.2

Спиновые моменты $\vec{S}_i$ также складываются и образуют результирующий спиновый момент, т.е. вектор суммарного спинового момента $\vec{S}$ равен:

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3 + \ldots \qquad (4.6)$$

При этом всевозможные численные значения вектора результирующего спинового момента атома определяются из соотношения:

$$|\vec{S}| = \frac{h}{2\pi}\sqrt{S(S+1)} \qquad (4.7)$$

Сложение суммарного орбитального момента $\vec{L}$ и результирующего спинового момента $\vec{S}$ дает вектор полного момента количества движения атома

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}, \qquad (4.8)$$

При этом возможные численные значения вектора полного момента атома определяется через квантовое число **J** следующим образом:

$$P_J = \frac{h}{2\pi}\sqrt{J(J+1)}\ . \qquad (4.9)$$

Квантовое число **J** определяется следующим образом:

$$\mathbf{J = L+S;\ L+S-1;\ L+S-2;\ldots.|L-S|}\ . \qquad (4.10)$$

Оно будет целым для четного числа электронов и полуцелым для нечетного числа электроном.