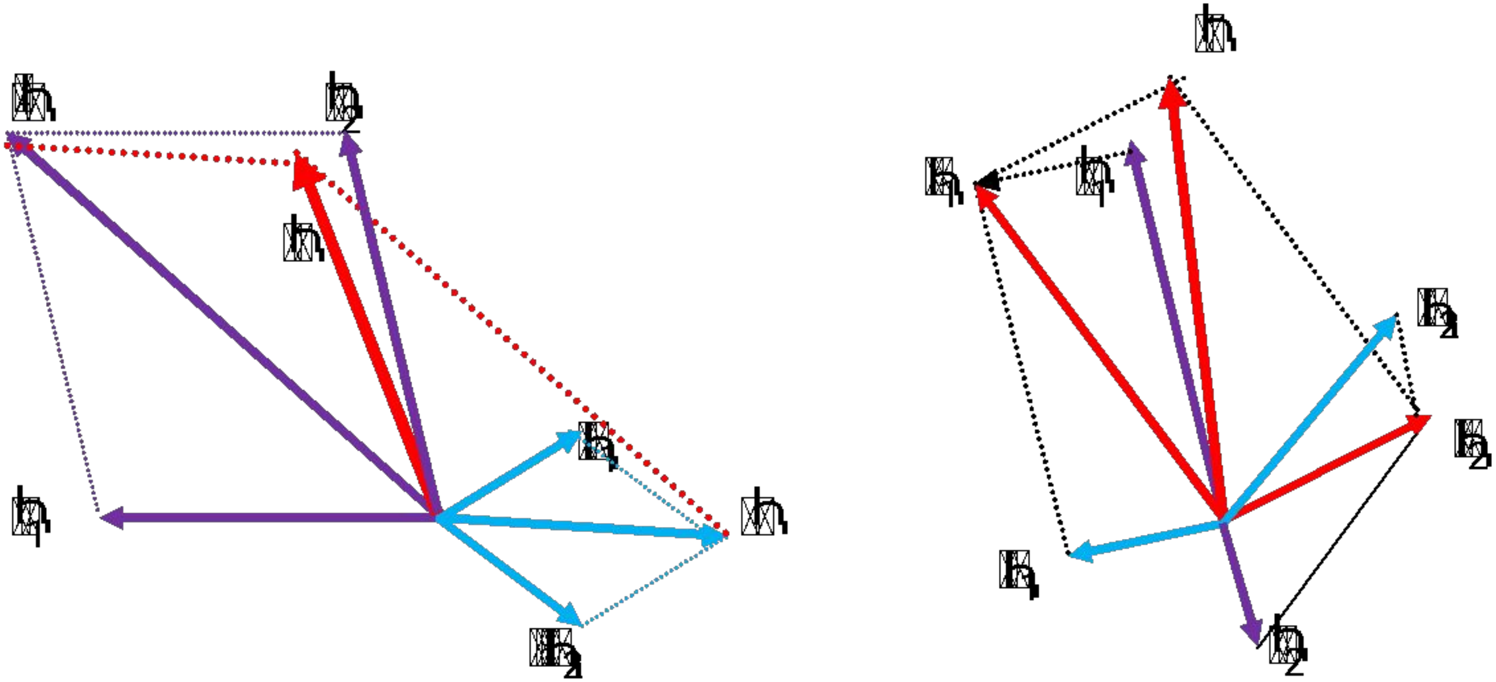
Атомная физика

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 $= \sigma$ или наоборот – сначала складываются и для различных электронов $= \sigma$ и $= \sigma$, 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 [illegible] = σ [illegible], в свою очередь, собственные моменты дают при взаимодействии общий спиновый момент [illegible] = σ [illegible]. Затем происходит взаимодействие [illegible] и [illegible] и образуется полный момент атома [illegible] = [illegible] + [illegible]. Этот тип взаимодействия называется ***LS* – связью** или **связью Рассель-Саундерса**; эта связь является наиболее распространенной.

Модуль суммарного орбитального момента электронов определяется квантовым числом L:

$$M_L = \hbar\sqrt{L(L+1)} \qquad (4.1)$$

Возможные значения L отличаются на целые числа.

Для атома, состоящего из двух электронов с орбитальными квантовыми числами l_1 и l_2:

$$L = l_1 + l_2,\ l_1 + l_2 - 1,\ \ldots,\ |l_1 - l_2|.$$

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 M_{L} на выделенное направление определяется выражением:

$$M_{Lz} = \hbar m_L \qquad (4.2)$$

$$m_L = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \ldots,\ \pm L.$$

Результирующий спиновый момент:

[illegible] (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.

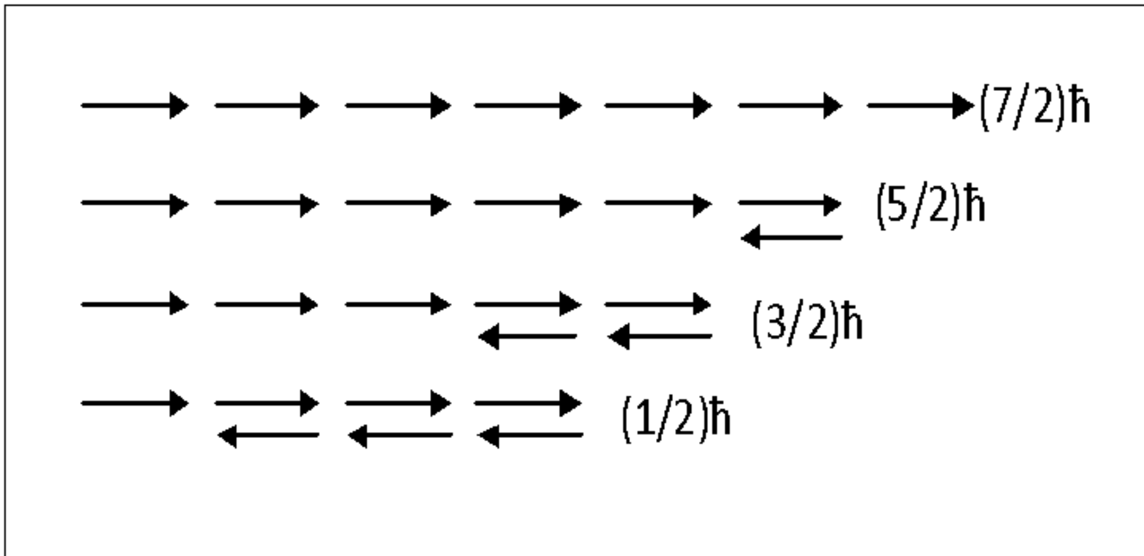


Рис. 4.2

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

$$[illegible] \qquad (4.4)$$

Квантовое число *J* может иметь следующие значения:

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

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:

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

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

При этом [illegible] = [illegible]/([illegible]π) ξ [illegible] и [illegible] = [illegible]/([illegible]π) ξ [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]| = [illegible]/([illegible]π) ξ [illegible]; [illegible]/([illegible]π) ξ [illegible]; [illegible]/([illegible]π) ξ [illegible]; [illegible]/([illegible]π) ξ [illegible]; [illegible]/([illegible]π) ξ [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 $\frac{\boxtimes}{\boxtimes\pi}$, т.е. $\xi\overline{\boxtimes}$; $\xi\overline{\boxtimes}$; $\xi\overline{\boxtimes\boxtimes}$; $\xi\overline{\boxtimes\boxtimes}$; $\xi\overline{\boxtimes\boxtimes}$
и проведем из начала координат дуги с этими радиусами.

Вдоль оси **OY** отложим вектор $\boxtimes = \frac{\boxtimes}{\boxtimes\pi}\xi\overline{\boxtimes\boxtimes}$ в тех же единицах $\frac{\boxtimes}{\boxtimes\pi}$. Из точки **A** с координатами **(0, $\xi\overline{\boxtimes\boxtimes}$)** проведем дугу радиусом $\boxtimes = \frac{\boxtimes}{\boxtimes\pi}\xi\overline{\boxtimes}$ (в единицах $\frac{\boxtimes}{\boxtimes\pi}$). 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 $\boxtimes = \boxtimes + \boxtimes$. На рис.4.2 приведены только два возможных направления вектора $\boxtimes$.

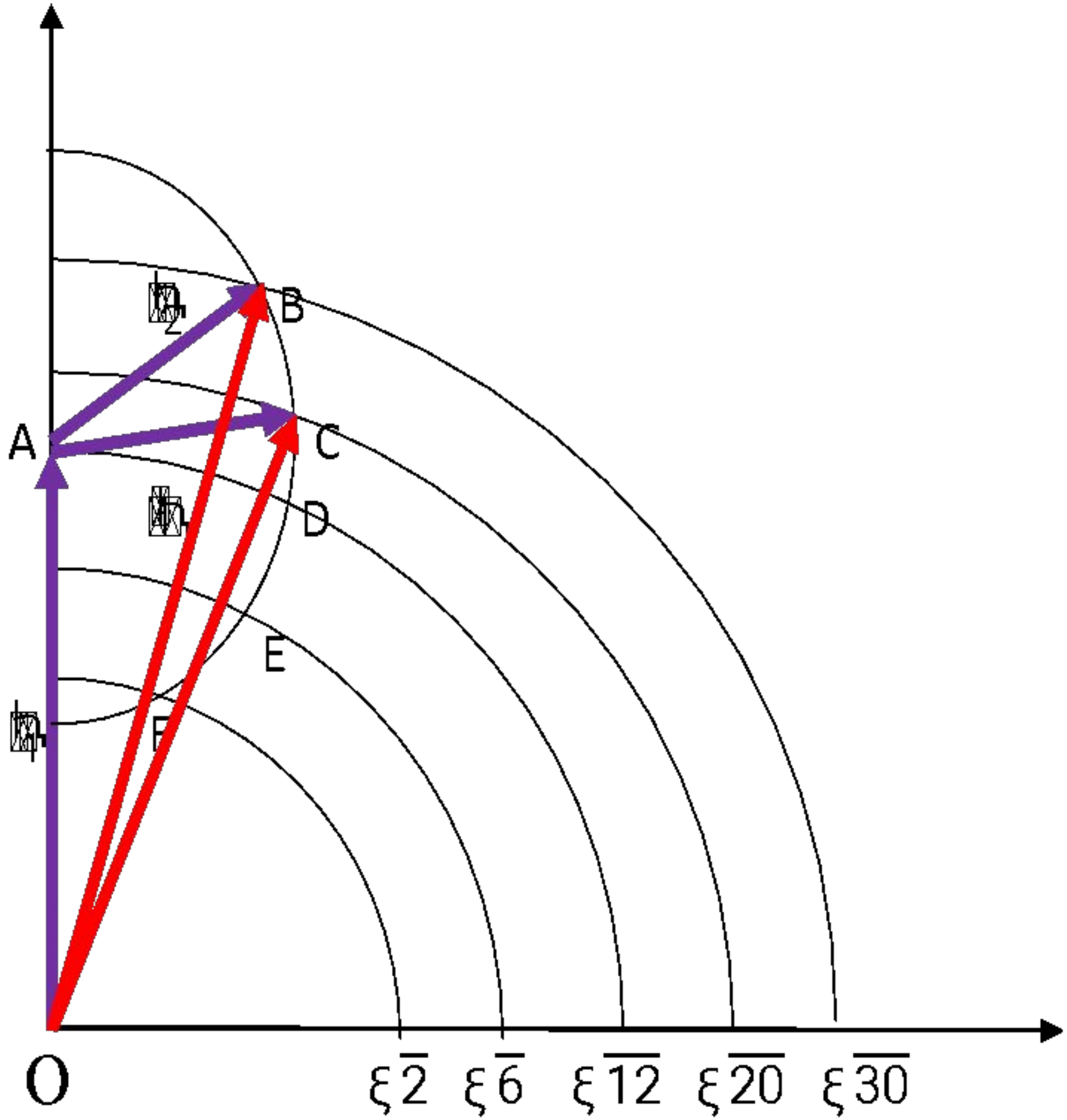


Рис.4.2

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

$$\vec{L}_S = \vec{L}_{s_1} + \vec{L}_{s_2} + \vec{L}_{s_3} + \ldots \qquad (4.6)$$

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

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

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

$$\vec{L}_J = \vec{L}_L + \vec{L}_S, \qquad (4.8)$$

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

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

Квантовое число **J** определяется следующим образом:

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

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