

**Latvijas Universitāte, Fizikas un matemātikas fakultāte, Fizikas nodaļa**  
**Laboratorijas darbu cikls “Kvantu fizikas laboratorija”**

**V. Rēvalds.**

---

1. Darba mērķi.....	- 2 -
2. Alumīnija spektra likumības .....	- 2 -
3. Praktiskā daļa .....	- 4 -
3. 1. Spektru fotografēšana.....	- 4 -
3. 2. Spekrālā aparatūra .....	- 5 -
4. Darba uzdevumi un darba izpildes gaita. ....	- 6 -
4. 1. Darba uzdevumi .....	- 6 -
4. 2. Darba uzdevumu izpildes gaita .....	- 7 -
4. 3. Grafika paraugs kvantu defekta noteikšanai .....	- 8 -
4. 4. Protokola paraugs un aprēķina piemērs .....	- 8 -
5. Pārskata daļa (Pielikums padziļinātai izprantei) .....	- 9 -
5. 1. Ievads .....	- 9 -
5. 2. Kvantu skaitļi .....	- 9 -
5. 3. Atoma vektoriālais modelis.....	- 11 -
5. 4. Pirmās grupas (sārnu metālu) elementu spektra struktūra .....	- 14 -
5. 5. Sārmzemju metālu spektri.....	- 20 -
5.6 Kontroljautājumi .....	- 20 -
6. Pielikums 2.....	- 21 -
6.1. Elektronu čaulu aizpildīšanās secība.....	- 21 -
6.2. Alumīnija līniju tabula. ....	- 22 -
6. 3. Dzīvsudraba atoma enerģijas līmeņu shēma .....	- 25 -
6.4. Periodiskās sistēmas elementu elektronu čaulas struktūra .....	- 26 -
6.5. No spina atklāšanas vēstures .....	- 27 -
7. Literatūra .....	- 29 -

## 1. Darba mērķi

Darba mērķis ir iepazīties ar tādu atomu spektriem, kuru čaulā ir vairāk par vienu elektronu. Visvienkāršākā uzbūve un arī spektra likumības ir ūdeņraža atomam. Tā spektrs sastāv no atsevišķām spektrālīniju sērijām. Spektru likumības apraksta vienkārša sakarība – Balmera formula, kurā ieiet tikai veseli skaitļi viens – galvenais - kvantu skaitlis. Pārējo elementu atomu uzbūve ir komplicētāka un tas izpaužas arī spektru struktūrā. To raksturošanai vajadzīgi vairāki kvantu skaitļi. Darbā dots šo kvantu skaitļu īss skaidrojums un to izmantošanas likumības sarežģītu atomu spektru pētīšanā.

## 2. Alumīnija spektra likumības

Alumīnijs ir elementu periodiskās sistēmas trešās grupas elements. Tā elektronu čaula satur 13 elektronus. Neierosināta alumīnija atoma elektronu konfigurācija ir  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p$ . Vairums ierosināto līmeņu veidojas, mainoties visvājāk saistītā, t.i., optiskā  $3p$  elektrona kvantu stāvoklim. Divi pārējie trešās čaulas elektroni  $3s^2$  neierosinās. Šie elektroni kopā ar iekšējo čaulu elektroniem veido atoma serdi. Alumīnija atoma serdes tāpat kā nātrija atoma serdes sastāvā ir aizpildītas elektronu čaulas. Tā rezultātā summārais orbitālais un spina moments ir vienādi ar nulli. Tādēļ alumīnija atoma serdes loma izpaužas tāpat kā sārmu metālu gadījumā. Lielā attālumā  $r$  no atoma serdes tā lauks ir sfēriski simetrisks un optiskā elektrona potenciālā enerģija ir

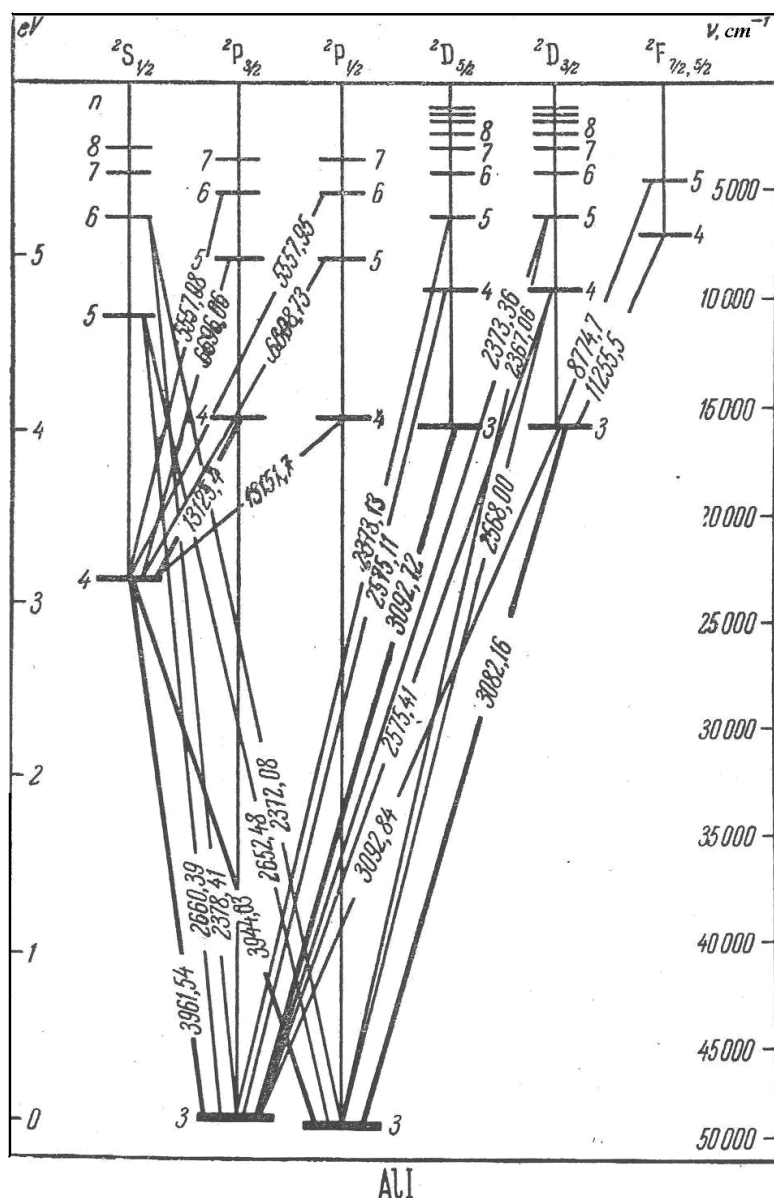
$$U(r) = -\frac{Z_a e^2}{r}, \quad (10)$$

kur  $Z_a e$  - atoma serdes lādiņš.

Tuvojoties atoma serdei, optiskais elektrons izsauc tā polarizāciju. Šī iemesla dēļ atoma serde iedarbojas uz optisko elektronu ar dipola pievilkšanās spēku. Ievērojot šos polarizācijas spēkus, optiskā elektrona potenciālā enerģija ir

$$U(r) = -\frac{Z_a e^2}{r} - \frac{\beta e^2}{2r^4}, \quad (11)$$

kur  $\beta$  - atoma serdes polarizācijas koeficients.



4. att. Alumīnija atoma enerģijas līmeņu shēma

Sakarība (11) izmantojama, ja elektrons atrodas pietiekami lielā attālumā no atoma serdes. Ja elektrons “ienirst” atoma serdē, tad pievilkšanās spēki, kas darbojas uz optisko elektronu, ievērojami pieaug, jo daļa elektronu pārstāj ekranēt kodola lādiņu. Formula (11) nav derīga stāvokļiem ar mazām kvantu skaitļa  $\lambda$  vērtībām.

Optiskā elektrona stāvokli alumīnija atomā raksturo ar tiem pašiem kvantu skaitļiem kā sārmu metālu atomos. Atšķirībā no ūdeņraža alumīnija atoma enerģiju nosaka ne tikai galvenais kvantu skaitlis  $n$ , bet gan arī orbitālais kvantu skaitlis  $\lambda$ . Tādēļ enerģijas līmeņu deģenerēšanās pēc kvantu skaitļa  $\lambda$ , ko novēro ūdeņraža gadījumā, šeit tiek noņemta, jo nepastāv Kulona lauks.

Analogi kā sārmu metālu gadījumā, alumīnija atomā elektrona enerģiju izteic šādi

$$E_n = -\frac{RZ_a^2}{n^{*2}} = -\frac{RZ_a^2}{(n + \Delta)^2}, \quad (12)$$

kur  $n^* = n + \Delta$  - efektīvais kvantu skaitlis,

$n$  - patiesais galvenais kvantu skaitlis (vesels skaitlis),

$\Delta$  - kvantu defekts (daļskaitlis).

Kvantu defekts raksturo alumīnija atoma enerģijas līmeņu atšķirību no vienelektronu sistēmas enerģijas līmeņiem, kura kodola lādiņš ir  $Z_a e$ . Atoma serde optisko elektronu pievelk spēcīgāk nekā tikpat liels  $Z_a e$  punktveida lādiņš. Tādēļ enerģijas līmeņi alumīnija atoma novietoti dziļāk nekā līmeņi ar tādām pat  $n$  vērtībām ūdeņraža atomā. Tas nozīmē, ka  $n^* < n$  un  $\Delta < 0$ , t.i., līmeņu kvantu defekti vienmēr ir negatīvi. Kvantu defekta lielums ir stipri atkarīgs no līmeņa kvantu skaitļa  $\lambda$ . Maksimālie pēc absolūtās vērtības kvantu defekti ir  $s$  līmeņiem ( $\lambda = 0$ ), jo  $s$ -elektroni visdziļāk “ienirst” atoma serdē. Nākošās, t.i.,  $p$  apakščaulas ( $\lambda = 1$ ) elektroni mazāk “ienirst” atoma serdē, tādēļ  $p$  līmeņu kvantu defektu absolūtās vērtības ir mazākas nekā  $s$ -līmeņiem. Par  $d$ -stāvokļu elektroniem var ar labu tuvinājumu pieņemt, ka tie nenokļūst atoma serdē. Šo līmeņu kvantu defektus nosaka atoma serdes polarizācija un tie ir mazi pēc absolūtās vērtības. Kvantu defekti tuvi nullei un enerģijas līmeņi praktiski sakrīt ar ūdeņraža līmeņiem  $f$ -elektronu ( $\lambda = 3$ ) gadījumā. Ievērojot polarizācijas spēkus, var iegūt šādu sakarību:

$$\Delta = -\frac{3\beta Z_a^2 [1 - \lambda(\lambda + 1)/3n^2]}{4a_0^3 (\lambda - 1/2)\lambda(\lambda + 1/2)(\lambda + 1)(\lambda + 3/2)} \quad (13)$$

kur  $a_0 = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} = 0,053 \text{ nm}$ .

Kvantu defekta  $\Delta$  atkarība no galvenā kvantu skaitļa ir vāja. Ar apmierinošu tuvinājumu var pieņemt, ka vienas sērijas robežās (pie dotās  $\lambda$  vērtības) kvantu defekts ir konstants. Turpretī novērojama stipra defekta  $\Delta$  atkarība no kvantu skaitļa  $\lambda$ .

Alumīnija spektrā ir tās pašas spektrālo līniju sērijas kā nātrija gadījumā. Atšķirībā no nātrija alumīnija apakšējais terms ir  $3^2P$ . Tā rezultātā spektra galvenā sērijā apmainās vietām ar blakus sērijām, kuras rodas pārejās uz zemāko  $3^2P$  termu. Šo sēriju līnijas alumīnija spektrā ir visintensīvākās un tās var novērot kā emisijā, tā arī absorbcijā.

Apakšējais terms  $3^2P$  lielā kvantu defekta dēļ ir zemu novietots. Alumīnijā rezonanses līnijas, kas atbilst pārejām  $3^2P - 4^2S$  (396, 52 nm, 394,401 nm) un  $3^2P - 3^2D$  (308,215 nm, 309,284 nm, 309,271 nm) atrodas tuvajā ultravioletajā daļā. Abu blakus sēriju pārejās līnijas ir vēl īsākiem viļņu garumiem.

Interesanti atzīmēt, ka terms  $4^2S$  līmeņu shēmā atrodas ievērojami zemāk par termu  $3^2D$ , kaut arī galvenais kvantu skaitlis pirmajam ir lielāks. Savukārt terms  $4^2P$  ir aptuveni vienā līmenī ar termu  $3^2D$ .

Abu blakus sēriju līniju struktūra nosaka apakšējā terma  $3^2P$  sašķelšanās.  $^2D$  termu sašķelšanās ir maza, tādēļ spektrālīnijām ir dubleta struktūra. Attālums starp dubleta komponentēm, izteikts viļņu skaitļos, ir konstants visiem sērijas locekļiem.

Ja tiek ierosināti arī atoma serdes elektroni, tad veidojas tā sauktie pārbīdīties termi. Alumīnijam viszemākais no šīs termu sistēmas ir kvarteta terms  $4p$ , kas pieder elektronu konfigurācijai  $3s3p^2$ . Tā ierosmes enerģija ir 3,6 eV. Pārējie šīs konfigurācijas termi atrodas augstāk par jonizācijas potenciālu. Pārbīdes termiem nav būtiskas nozīmes alumīnija spektrā un tie līmeņu shēmā nav parādīti.

### 3. Praktiskā daļa

#### 3. 1. Spektru fotografēšana

Fotomateriālu gaismas jutīgais jeb emulsijas slānis ir speciāli izgatavota želatīna kārtiņa ar tajā vienmērīgi izkliedētiem sudraba halogenīda (visbiežāk AgBr) mikrokristāliem -

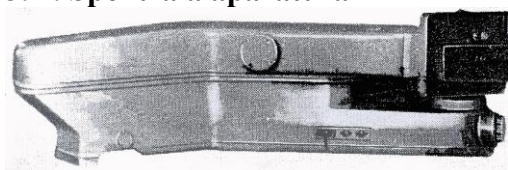
mikrokristālu suspensija. Gaismas iedarbības dēļ šajos kristālos notiek AgBr molekulas sabrukšana un izdalās sudraba atomi. Tie veido latentā (slēptā) attēla centrus.

Attīstošajām vielām iedarbojoties, tie sudraba halogenīda kristāli, kuri satur latentā attēla centrus, ļoti ātri reducējas līdz metāliskam sudrabam. Kristāli, uz kuriem gaismas nav iedarbojusies, t. i., tie, kuri nesatur latentā attēla centrus, reducējas ļoti lēnām. Pirmā veida kristāli pēc attīstīšanas veido redzamo attēlu, otrā veida kristāli – plīvuru (fonu).

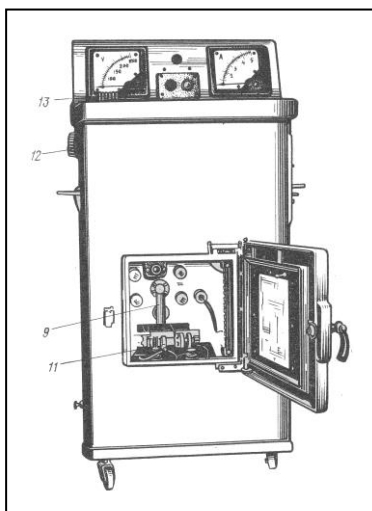
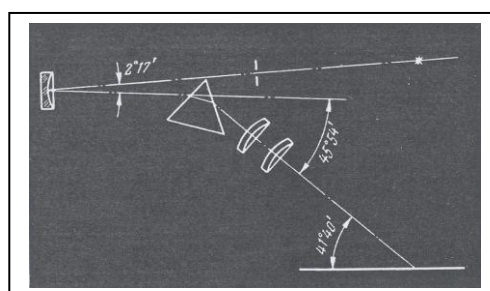
Pēc attīstīšanas emulsiju atbrīvo no nesadalītā sudraba halogenīda, izšķīdinot to fiksējošā (parasti nātrija hiposulfīta) šķīdumā. Pēc ķīmiskās apstrādes fotomateriālus skalo ūdenī.

Fotogrāfiskajam attēlam ir graudaina struktūra. Grauda lielums atkarīgs no emulsijas tipa. Jūtīgas emulsijas ir rupjgraudainas, mazjūtīgas - sīkgraudainas. Konkrētā darba izstrādē parasti izmanto vidējas jutības fotomateriālus, ar kuriem var iegūt labas kontrastainas spektrālīnijas.

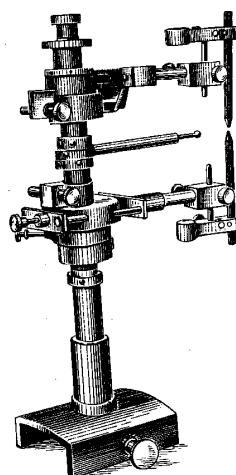
### 3. 2. Spektrālā aparatūra



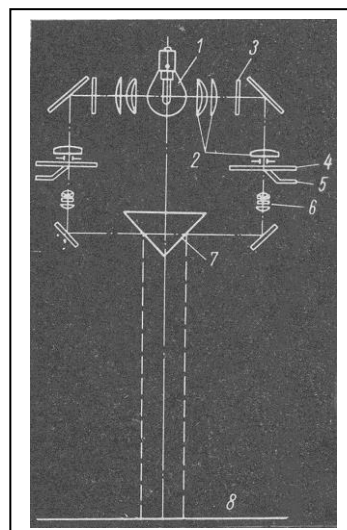
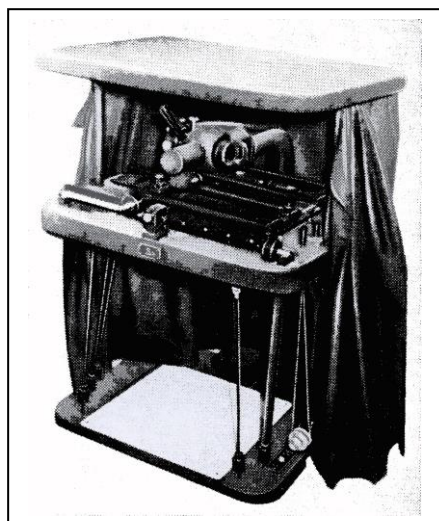
Spektrogrāfa ISP – 28 kopskats un optiskā shēma



Loka ģenerators DG – 2



Elektrodu turētājs



Spektra projektora DSP-1 kopskats un optiskā shēma. Aparatūras apraksti un parametru dati pieejami darba vietā.



Darba vietas kopskats: spektrogrāfs ISP-28, lokizlādes ģenerators DG-2

#### **4. Darba uzdevumi un darba izpildes gaita.**

##### **4. 1. Darba uzdevumi**

1. Alumīnija spektra fotografēšana ar spektrogrāfu ИСП-28 (30). Tam nolūkam izmanto lokizlādi starp alumīnija elektrodiem. Atšifrēšanai izmantot dzelzs spektru. Visus spektrus fotografē caur Hartmaņa diafragmu. Ērtības labā ieteicams uzfotografēt arī skalu.
2. Spektrogrammas atšifrēšana un alumīnija līniju viļņu garumu noteikšana. Spektrogrammu atšifrēšanai izmanto spektroprojektoru un spektrālīniju atlantu.

Alumīnija spektrālīniju viļņu garumus nosaka pēc atlanta viļņu garumu skalas, precizējot pēc tabulas datiem (2. pielikums).

3. Līniju grupēšana sērijās un kvantu defektu aprēķināšana.

#### 4. 2. Darba uzdevumu izpildes gaita

Alumīnija līniju grupēšanu spektrālajās sērijās var izdarīt, izmantojot spektrālīniju tabulas (2.pielikums). Pēc tam, kad sērijas ir noskaidrotas, nosaka sērijas līniju augšējo līmeņu efektīvos kvantu skaitļus. Tam nolūkam var izmantot izteiksmi

$$E_{n+1} - E_n = \frac{R}{n^{*2}} - \frac{R}{(n^* + 1)^2} \quad (14)$$

Termu enerģijas starpība  $E_{n+1} - E_n$  vienāda dotās sērijas līniju viļņu skaitļu  $\tilde{\nu}_{n+1} - \tilde{\nu}_n$  starpībai, kuru augšējie līmeņi ir  $n+1$  un  $n$ , bet apakšējais līmenis ir kopīgs. Enerģijas starpību var aprēķināt, ja viļņu garumi ir zināmi.

Vienādojuma (14) analītiskais risinājums attiecībā pret  $n^*$  ir sarežģīts, tāpēc  $n^*$  atrašanai ieteicams izmantot grafisko metodi. Uz abscisas ass atliek skaitļa  $n^*$  vērtības, bet uz ordinātas  $R \left[ \frac{1}{n^{*2}} - \frac{1}{(n^* + 1)^2} \right]$ . Rīberga konstantes vērtība alumīnijam ir  $R = 109,735 \text{ cm}^{-1}$ . Grafiku zīmē skaitļa  $n^*$  vērtībām no 1,5 līdz 7. Pēc tam, zinot doto līmeņu viļņu skaitļu starpību  $\tilde{\nu}_{n+1} - \tilde{\nu}_n$ , pēc grafika atrod efektīvo kvantu skaitli un kvantu defektu. Piemēram, līmeņu  $4^2S_{1/2}$  un  $5^2S_{1/2}$  gadījumā

$$\nu_{5s} - \nu_{4s} = R \left[ \frac{1}{n^{*2}} - \frac{1}{(n^* + 1)^2} \right],$$

kur  $n^* = 4 - \Delta s$ ,

$$n^* + 1 = 4 - \Delta s + 1.$$

Līdzīgā veidā atrod efektīvos kvantu skaitļus un kvantu defektus  $p$  un  $d$  līmeņiem. Vispārīgā formā  $\Delta = n^* - n$ . Izmantojot iegūtās  $\Delta$  vērtības pēc izteiksmes (13) izskaitļo atoma serdes polarizācijas koeficientu  $\beta$ . Šajā gadījumā jāizmanto  $^2D$  līmeņu kvantu defekta vērtība. Izteiksmē (13)  $Z_a = 1$ .

Tālāk var aprēķināt sērijas robežu. Piemēram, asai sērijai var rakstīt

$$\tilde{\nu}_{ns} = \frac{1}{\lambda_{ns}} = \frac{R}{(3 - \Delta p)^2} - \frac{R}{(n - \Delta s)^2} \quad (15)$$

Sērijas robežu iegūsim, ja  $n \rightarrow \infty$ . Apzīmēsim

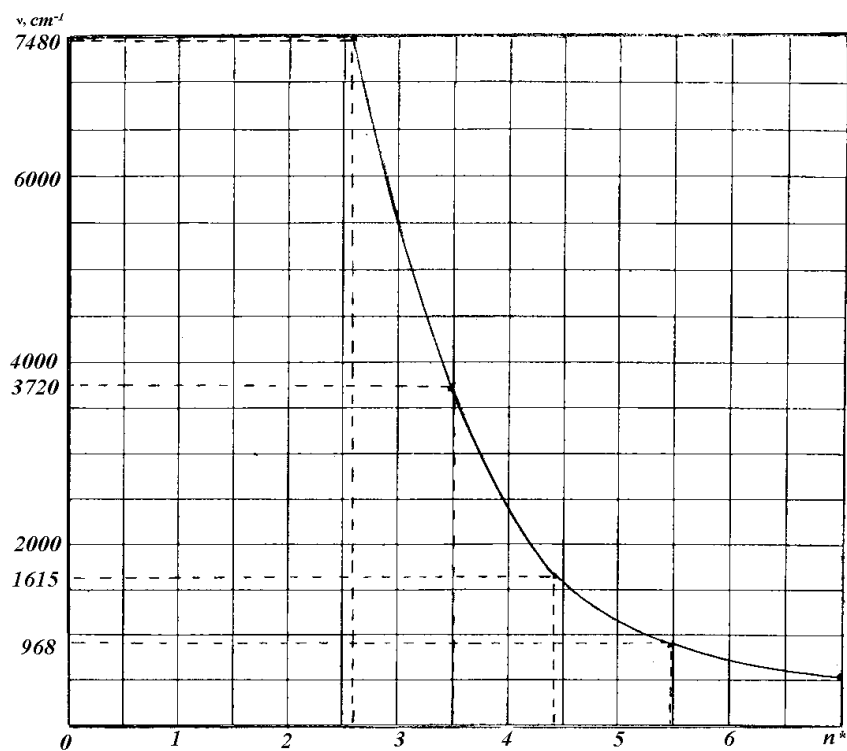
$$\tilde{\nu}_{\infty} = \frac{R}{(3 - \Delta p)^2},$$

tad

$$\tilde{\nu}_{\infty} = \tilde{\nu}_{ns} + \frac{R}{(n - \Delta s)^2} \quad (16)$$

Pēc sērijas robežu viļņu skaitļu vērtībām var aprēķināt alumīnija apakšējā terma  $3^2P$  efektīvo kvantu skaitli un kvantu defektu

#### 4. 3. Grafika paraugs kvantu defekta noteikšanai



5. att.

#### 4. 4. Protokola paraugs un aprēķina piemērs

$\lambda, \text{\AA}$	Kvantu pāreja	Ezem	Eaugš	$\Delta E, \text{eV}$	$\Delta \nu, \text{cm}^{-1}$	$n^*$	$\Delta s$
11403,8	3p2P-4s2S	2,10	3,19	0,93	7480	2,6	1,4
6160,7	3p2P-5s2S	2,10	4,12	0,39	3720	3,5	1,5
5153,4	3p2P-6s2S	2,10	4,51	0,20	1615	4,4	1,6
4751,8	3p2P-7s2S	2,10	4,71	0,12	963	5,5	1,5
4545,2	3p2P-8s2S	2,10	4,83				

Aprēķinos izmantot sakarību  $1\text{eV} = 8065,8 \text{ cm}^{-1}$ . Iegūtās  $\Delta \nu$  vērtības izmanto, lai no konstruētā grafika nolāsītu efektīvo kvantu skaitli  $n^*$

$\Delta \nu, \text{cm}^{-1}$	n	$\Delta s = n - n^*$
7480	4	$4 - 2,6 = 1,4$
3720	5	$5 - 3,5 = 1,5$
1615	6	$6 - 4,4 = 1,6$
968	7	$7 - 5,5 = 1,5$

Rezultāts:  $\Delta s = 1,4 \pm 0,1$



## 5. Pārskata daļa (Pielikums padziļinātai izprantei)

### 5. 1. Ievads

1869. gadā krievu zinātnieks Dimitrijs Mendelējevs (1834 – 1907) konstatēja elementu ķīmisko īpašību periodiskumu. Uz šī fakta pamata viņš izveidoja ķīmisko elementu periodisko tabulu - Mendelējeva tabulu, kur elementi ir izvietoti vairākos periodos. Izrādījās, ka ne tikai ķīmiskās īpašības, bet gan arī optisko spektru struktūra likumsakarīgi mainās atbilstoši elementa stāvoklim periodā.

ELEMENTU PERIODISKĀ SISTĒMA

IA																										VIIA 0	
1 H 1.0079																1 H 1.0079	2 He 4.00260										
3 Li 6.941	4 Be 9.01218															5 B 10.81	6 C 12.011	7 N 14.0067	8 O 15.9994	9 F 18.998403	10 Ne 20.179						
11 Na 22.98977	12 Mg 24.305															13 Al 26.98154	14 Si 28.0855	15 P 30.97376	16 S 32.06	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948						
19 K 39.0983	20 Ca 40.08	21 Sc 44.9559	22 Ti 47.90	23 V 50.9415	24 Cr 51.996	25 Mn 54.9380	26 Fe 55.847	27 Co 58.9332	28 Ni 58.69	29 Cu 63.546	30 Zn 65.38	31 Ga 69.72	32 Ge 72.59	33 As 74.9216	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80										
37 Rb 85.4678	38 Sr 87.62	39 Y 88.9059	40 Zr 91.22	41 Nb 92.9064	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.9055	46 Pd 106.4	47 Ag 107.868	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.69	51 Sb 121.75	52 Te 127.60	53 I 126.9045	54 Xe 131.30										
55 Cs 132.9054	56 Ba 137.33	57 La 138.9055	58 Ce 140.12	59 Pr 140.9077	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.4	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.9254	66 Dy 162.50	67 Ho 164.9304	68 Er 167.26	69 Tm 168.9342	70 Yb 173.04	71 Lu 174.967											
87 Fr (223)	88 Ra 226.0254	89 Ac 227.0278	90 Th 232.0381	91 Pa 231.0369	92 U 238.029	93 Np 237.0482	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (260)											

Lantanīdi

Aktinīdi

Piemēram, aplūkojot trešā perioda pirmo elementu nātriju, konstatējam, ka tā spektrālīnijas līdzīgi kā ūdeņradim, var grupēt sērijās. Atšķirībā no ūdeņradi Balmera formulā parādās daļskaitļi un līnijas dubultojas, t.i., tām ir dubulta struktūra. To pašu var sacīt par pārējo sarmu metālu (Li, K, Cs, Rb) spektriem. Nākamajam perioda elementam aiz nātrija – magnijam – arī spektrālīnijas var grupēt sērijās. Tām ir trīskārša struktūra – parādās tripleti. Perioda trešajam elementam alumīnijam līdzīgi kā nātrijam spektrā ir dubleti, taču atšķirībā no nātrija parādās arī kvadrupleti, t.i., vienas līnijas vietā veidojas četras komponentes. Līdzīgu likumsakarību novēro arī pārējos Mendelējeva sistēmas periodos.

Tripletu struktūru novēro ne tikai magnijam, bet gan arī pārējiem sārmzemju metāliem (Be, Mg, Ca, Sr, Ba). Dubletu un kvadrupletu struktūra ir trešās grupas elementiem (B, Al, Ga, In, Tl). Noteiktām likumībām pakļaujas arī pārējo grupu elementu spektri. Lai šos spektrus klasificētu, nācās bez galvenā kvantu skaitļa ieviest vēl virkni citus kvantu skaitļus.

### 5. 2. Kvantu skaitļi

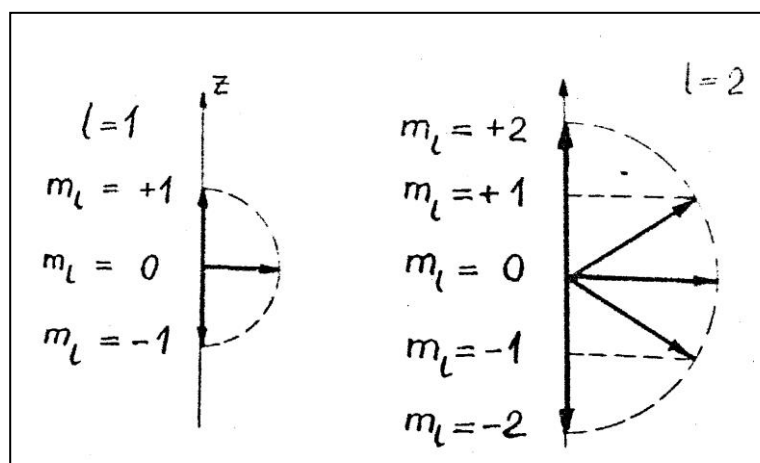
Atoms izstaro enerģijas kvantu (fotonu) tad, ja elektrons pāriet no stacionāra stāvokļa, kura enerģija ir  $E_k$  uz citu stacionāru stāvokli ar mazāku enerģiju  $E_i$ . Izstarotā kvanta enerģija vienāda ar šo enerģiju starpību:

$$h\nu_{ki} = E_k - E_i \quad (1)$$

Atoma enerģijas stāvokļus sistematizē un raksturo saskaņā ar kvantu mehānikas likumiem. Stāvokļu enerģija ir tieši saistīta ar parametriem, kas nosaka atoma elektronu

čaulas uzbūvi. Lai pilnīgi raksturotu elektrona enerģijas stāvokli, nepieciešams tik daudz kvantu skaitļu, cik brīvības pakāpju ir elektronam atomā. Parasti izmanto piecus kvantu skaitļus:  $n, l, m_l, s$  un  $m_s$ .

1. Galvenais kvantu skaitlis  $n$  nosaka dotā stacionārā stāvokļa enerģiju. Tas var pieņemt vērtības  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Visi iespējamie elektronu stāvokļi, ko raksturo ar vienu un to pašu galvenā kvantu skaitļa vērtību, veido t.s. elektrona čaulu. Kvantu skaitlis  $n$  norāda čaulas kārtas skaitli.
2. Orbitālais kvantu skaitlis  $l$  nosaka elektrona kustības daudzuma momentu. Šis moments arī ir kvantēts lielums, t.i., pie dotā galvenā kvantu skaitļa  $n$  pieņem virkni diskrētu vērtību:  $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ . Elektrona stāvokļus, kur  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ , pieņemts atzīmēt ar burtiem  $s, p, d, f, \dots$ . Atbilstošos elektrona stāvokļus sauc attiecīgi par  $s$ -stāvokļiem,  $p$ -stāvokļiem utt. Šo apzīmējumu izcelsme saistīta ar spektrālīniju sēriju nosaukumiem sārmu metālu spektros: “sharp”, “principale”, “diffuse”, “fundamental”.
3. Orbitālais magnētiskais kvantu skaitlis  $m_l$  nosaka orbitālā kustības daudzuma momenta  $l$  projekciju uz kādu izvēlētu virzienu telpā (piemēram, ārējā magnētiskā lauka virzienu). Citiem vārdiem sakot, skaitlis  $m_l$  raksturo elektronu orbītu telpisko orientāciju. Pie dotās  $l$  vērtības  $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ .



1. att. Kvantu skaitlis  $m_l$  nosaka orbitālā kustības daudzuma momenta  $l$  projekciju uz kādu izvēlētu virzienu telpā

4. Spina kvantu skaitlis tiek interpretēts kā elektrona pašmoments, kas nav atkarīgs no orbitālās vērtības. Spinu var uzskatīt kā daļiņas jaunu, iekšēju kustības brīvības pakāpi. Tas pieņem tikai vienu vērtību  $s = \frac{1}{2}$ .
5. Spina projekcijas kvantu skaitlim  $m_s$  arī ir kvantēts lielums un var pieņemt divas vērtības:  $m_s = -s$  un  $m_s = +s$ . Tātad,  $m_s = \pm 1/2$ . Tas nozīmē, ka spins var orientēties tikai paralēli un antiparalēli dotajam izvēlētajam virzienam. Citas spina orientācijas nav iespējamās.

### 5. 3. Atoma vektoriālais modelis

Saskaņā ar Pauli principu, atomā nevar būt divu vai vairāk elektronu ar vienādām skaitļu  $n, l, m_l, m_s$  vērtībām. Tādējādi, pie  $l = 0$  – ne vairāk kā divi  $s$  elektroni, pie  $l = 1$  – ne vairāk kā seši  $p$ -elektroni, pie  $l = 2$  – ne vairāk kā desmit  $d$ -elektroni, utt. (1. tab.).

1. tabula

$l$	$m_l$	$m_s$	Maksimālais elektronu skaits
0	0	+1/2   -1/2	2
1	+1 0 -1	+1/2   -1/2 +1/2   -1/2 +1/2   -1/2	6
2	+2 +1 0 -1 -2	+1/2   -1/2 +1/2   -1/2 +1/2   -1/2 +1/2   -1/2 +1/2   -1/2	10

Elektronu stāvokļu kopums pie dotā galvenā kvantu skaitļa  $n$  un atļautajām  $l, m_l, s$  un  $m_s$  vērtībām veido elektronu čaulu. Ja čaulā ir maksimāli iespējamais elektronu skaits, tad to sauc par aizpildītu.

Atomi lielākoties ir daudzelektronu sistēmas. Katrs elektrons šādos atomos atrodas vidējotā elektriskā laukā, ko rada kodols un pārējie elektroni. Tāpēc elektronu konfigurāciju daudzelektronu atomos raksturo summārie kvantu skaitļi, kas atkarīgi no elektronu savstarpējām mijiedarbībām jeb t. s. saites veida. Izšķir divus šādu saišu veidus: Rasela-Sondersa jeb  $L - S$  saiti un  $j - j$  saiti. Ar pirmo var raksturot elektronu mijiedarbību vieglajos atomos (piemēram, He un sārmu metālu atomos), turpretī  $j - j$  saite tīrā veidā nav sastopama. Ar to parasti raksturo smago atomu ierosinātos stāvokļus. Lielākoties atomos pastāv abu šo saišu veidu starpstāvokļi.

Rasela-Sondersa saites gadījumā visas elektronu čaulas kopējais orbitālais kustības daudzuma moments veidojas no atsevišķo elektronu impulsu momentiem:  $L = \sum l_i$ . Pilnais spins  $S$ , savukārt, veidojas no atsevišķo elektronu spiniem:  $S = \sum s_i$ . Pilnais jeb kopējais elektronu čaulas kustības daudzuma moments  $J$  summējas no  $L$  un  $S$  šādi:  $J = L + S$ .

Jebkurai noslēgtai elektronu čaulai kopējais orbitālais impulsa moments vienāds ar nulli:  $L = 0$ . Atoma dažādos enerģijas stāvokļus ar dažādām  $L$  vērtībām  $L = 0, 1, 2, 3, \dots$  apzīmē ar lielajiem burtiem  $S, P, D, F, \dots$ .

Kvantu skaitlis  $J$  var pieņemt šādas vērtības:

$$J = |L + S|, |L + S - 1|, \dots, |L - S|$$

Absolūtās vērtības jāņem tāpēc, ka negatīvam kopējam kustības daudzuma momentam nav fizikālas jēgas.

Ja  $L \geq S$ , tad  $J = L + S, L + S - 1, \dots, L - S$ . Tātad,  $J$  pieņem pavisam  $2S + 1$  vērtību. Šo  $J$  vērtību skaitu sauc par multiplicitāti:  $\propto = 2S + 1$ .

Ja  $L \leq S$ , tad  $J = S + L, S + L - 1, \dots$ ; tātad,  $J$  pieņem pavisam  $2L + 1$  vērtību.

$J$  vērtību skaitam un multiplicitātei ir būtiska nozīme, aplūkojot atomu enerģijas līmeņu sīkstruktūru.

j-j saites gadījumā katra elektrona orbitālais un spina moments summējas rezultējošā kustības daudzuma momentā:  $j_i = \lambda_i + s_i$ . Atoma pilnais moments  $J$  ir šo elektronu rezultējošo momentu summa:  $J = \sum j_i$ .

Kvantu skaitļi  $L$  un  $J$  pilnībā raksturo atoma stāvokli. Simboliski to pieraksta t.s. terma veidā:  $n^{\text{e}} L_J$ , kur  $L = S, P, D, F, \dots$ , t.i., norāda  $L$  vērtību,  $\text{e} = 2S + 1$  – multiplicitāte, no kuras var noteikt  $S$  vērtību,  $n$  galvenais kvantu skaitlis.

Tā, piemēram, terms  $3^2 D_{5/2}$  norāda, ka tiek aplūkots elektronu čaula ar kārtas numuru 3 ( $n=3$ ), kurai  $L = 2$  un  $S = 1/2$ .  $J = 5/2$  nozīmē, ka tiek apskatīts enerģijas stāvoklis, kuram  $J = L + S$ .

Visu iespējamo atoma enerģijas stāvokļu kopums vēl nedod priekšstatu par reālo spektru. Tas ir tāpēc, ka realizējas ne visas pārejas no viena enerģijas stāvokļa uz citu. Pārejas iedala atļautajās un aizliegtajās. Atļauto pāreju varbūtība ir ar kārtu  $10^7 - 10^8 \text{ s}^{-1}$  (ierosinātā stāvokļa dzīves ilgums  $10^{-8} - 10^{-7} \text{ s}$ ), aizliegtajām – vismaz par kārtu mazāka. Kvantu mehānika dod iespēju atrast t.s. izvēles likumus, respektīvi, noteikt, kādas pārejas ir atļautas, kādas – aizliegtas. Izrādās, ka starp diviem dažādiem atoma stāvokļiem, kuri raksturojas ar kvantu skaitļiem  $n_1, L_1, J_1, S_1$  un  $n_2, L_2, J_2, S_2$ , iespējamās tikai tās pārejas, kurām kvantu skaitļi:

$$\Delta n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$\Delta L = \pm 1$$

$$\Delta J = 0, \pm 1 \text{ (izņemot gadījumu } J_1 = 0 \rightarrow J_2 = 0)$$

$$\Delta S = 0 \text{ (Rasela-Sondersona saites gadījumā)}$$

Šie tad arī ir tā saucamie izvēles likumi.

Visus iespējamās atoma stacionāros stāvokļus pieņemts attēlot grafiski enerģijas līmeņu diagrammas veidā. Šāda diagramma ir zīmējums, kurā vertikālā virzienā ar horizontālām līnijām parādītas enerģijas vērtības, kādas var būt atomam. Šie enerģijas līmeņi un attālumi starp tiem ir atšķirīgi dažādiem ķīmiskajiem elementiem, bet vienādi visiem viena elementa atomiem. Līnijas, kas savieno atsevišķus līmeņus, attēlo atļautās pārejas.

Visvienkāršāk sēriju likumības izpaužas ūdeņraža atomā:

$$\tilde{\nu}_{ik} = \frac{1}{\lambda_{ik}} = R \left[ \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_k^2} \right] \quad (2)$$

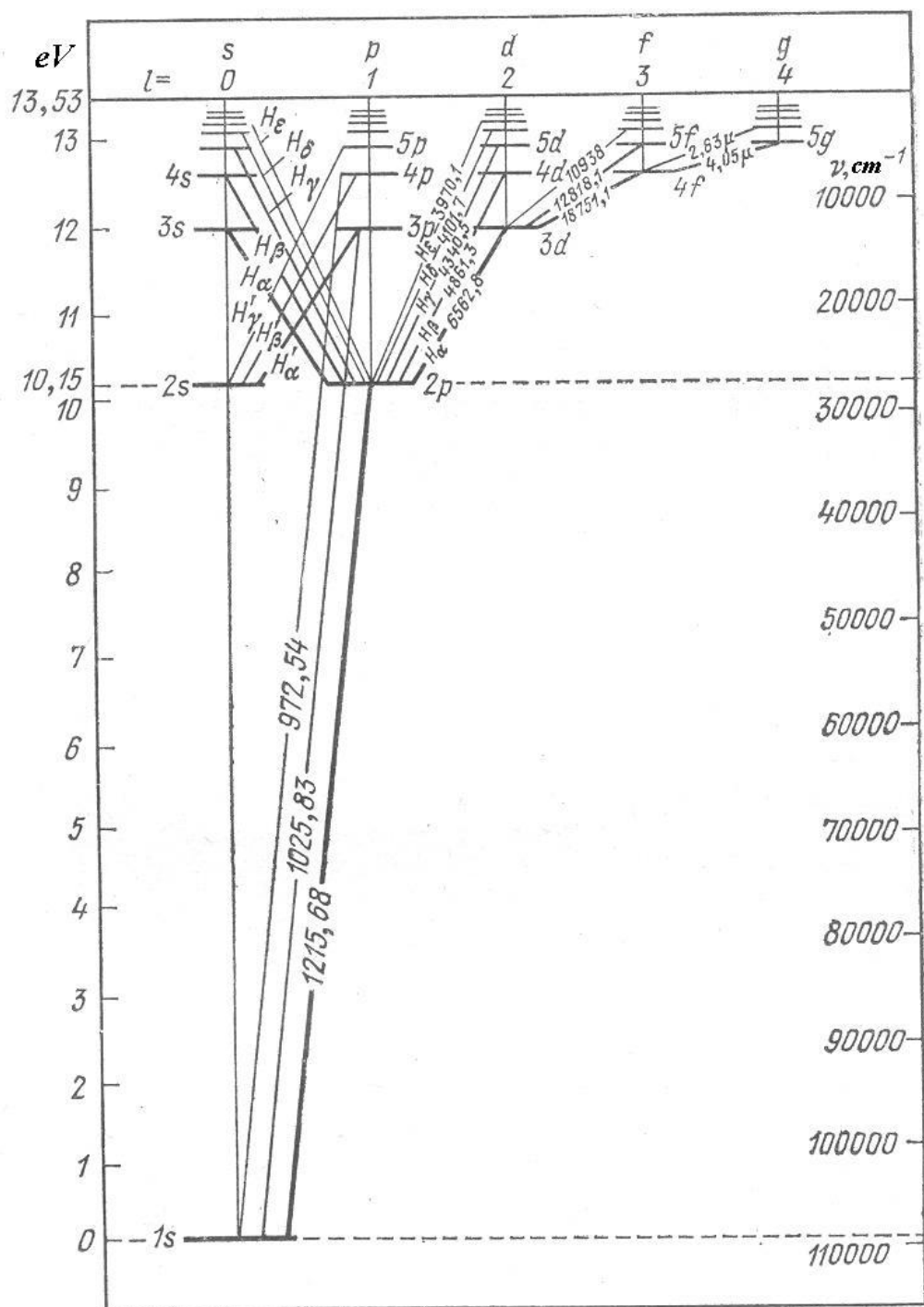
kur  $\tilde{\nu}_{ik}$  - viļņu skaitlis pārejai starp enerģijas līmeņiem  $i$  un  $k$ ,

$\lambda_{ik}$  - šīs pārejas viļņu garums,

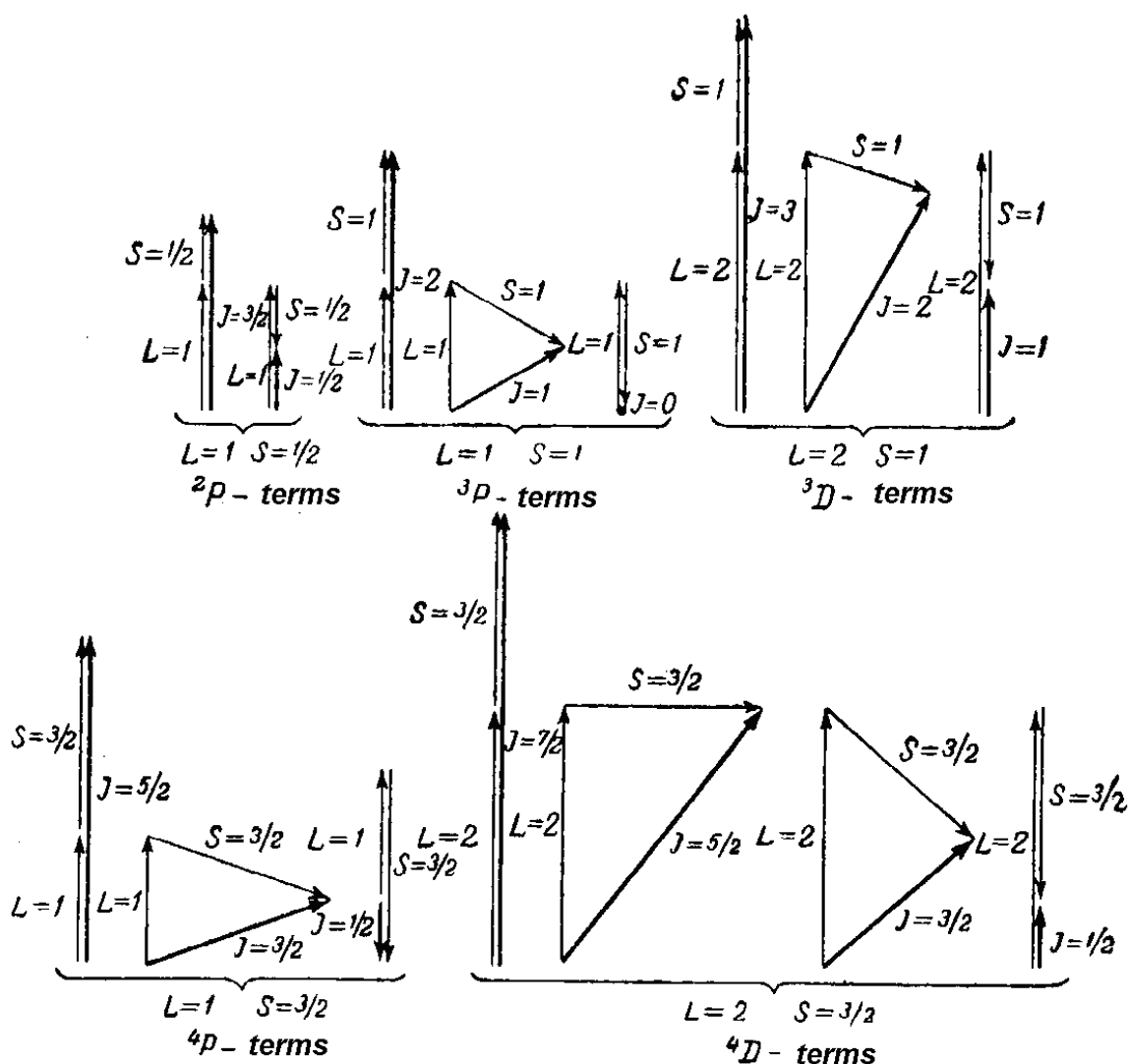
$R$  - Rīdberga konstante,

$n_i$  un  $n_k$  - galvenie kvantu skaitļi, kas raksturo atoma stacionāros stāvokļus.

Ūdeņraža atoma enerģija nav atkarīga no pārējiem kvantu skaitļiem. Ūdeņraža enerģijas stāvokļi ir deģenerēti, t.i., stāvokļiem ar doto kvanta skaitļa  $n$  vērtību enerģijas ir vienādas neatkarīgi no kvantu skaitļu  $\lambda$  un  $m_s$  vērtībām.



Ūdeņraža atoma enerģijas līmeņu shēma (ieskaitot sīkstruktūru).



$L$  un  $S$  vektoriālās summēšanas piemēri. Attēlā parādītas visas iespējamās  $L$  un  $S$  savstarpējās kombinācijas un tām atbilstošais summārais kustības daudzuma moments. Vektors  $J$  attēlots ar „treknu” līniju. Vektoru  $J$ ,  $L$  un  $S$  absolūtās vērtības iegūst, reizinot ar  $h/2\pi$ .

#### 5. 4. Pirmās grupas (sārņu metālu) elementu spektra struktūra

Ūdeņraža gadījumā eksistē tādas līniju grupas, kuras raksturojas ar aizvien pieaugošām galvenā kvantu skaitļa  $n$  vērtībām. Šādu spektrālīniju secību sauc par spektrālo sēriju.. Visu vienas sērijas līniju viļņu garumi ir savstarpēji saistīti. Sērijas rodas, elektronam pārejot no  $n_k = n_i + 1, n_i + 2, \dots$ , uz stāvokli ar kvantu skaitli  $n_i = \text{const}$ .

Sārņu metālu atoms ir sarežģīta sistēma, kura sastāv no kodola, iekšējām elektronu čaulām un viena ārējā elektrona. Šo elektronu sauc arī par optisko jeb valences elektronu. Tieši šī elektrona stāvokļa izmaiņas nosaka sārņu metālu atomu optiskās īpašības un spektrus. Pārējie atoma  $Z - 1$  elektroni kopā ar kodolu veido t. s. atoma serdi. Pieņemot, ka

ārējais elektrons atrodas pietiekami lielā attālumā no kodola, sārnu metāla atomu var aprakstīt kā “ūdeņražveidīgu” sistēmu, kurā efektīvā lādiņa  $z_{\text{ef}} e$  laukā kustas ar kodolu vāji saistīts elektrons.

Arī sārnu metālu spektros var izšķirt vairākas spektrālīniju sērijas. Taču tās vairs nevar izteikt ar tik vienkāršu formulu kā ūdeņraža atomos. Bet visos gadījumos no empīriskām formulām izriet, ka spektra līniju viļņu skaitli  $\tilde{\nu}$  vienmēr var izteikt kā divu termu  $T(n_i) = R/(n_i - \Delta_i)^{-2}$  un  $T(n_k) = R/(n_k - \Delta_k)^{-2}$  starpību

$$\nu_{ik} = R \left[ \frac{1}{(n_i - \Delta_i)^2} - \frac{1}{(n_k - \Delta_k)^2} \right], \quad (3)$$

kur  $n_i$  un  $n_k$  - galvenie kvantu skaitļi,

$R$ - Rīdberga konstante,

$\Delta_i$  un  $\Delta_k$  - t. s. kvantu defekti – korekcijas, kas nav vienādas ar veselu skaitli. Tās nav atkarīgas no galvenā kvantu skaitļa  $n$ , bet ir atkarīgas no kvantu skaitļa  $\lambda$ .

Šādu korekciju jeb kvantu defektu nepieciešams ievest tāpēc, ka optiskais elektrons polarizē atoma serdi, pievelkot kodolu un atgrūžot elektronus. Tā iespaidā Kulona mijiedarbības potenciālajai enerģijai starp diviem punktveida lādiņiem vēl jāpievieno loceklis, kas vienāds ar elektrona un inducētā dipola momenta mijiedarbības enerģiju. Ievērojot šo mijiedarbības enerģiju, Šrēdingera stacionārā vienādojuma atrisinājums atšķiras no ūdeņraža atoma enerģijas ar to, ka sārnu metālu atomu enerģija kļūst atkarīga ne tikai no galvenā kvantu skaitļa  $n$ , bet arī no orbitālā kvantu skaitļa  $\lambda$ . Līdz ar to ūdeņraža atoma viena enerģijas līmeņa vietā sārnu metālu atomam ir  $n$  enerģijas līmeņi (jo  $\lambda$  var pieņemt  $n$  dažādas vērtības). Aplūkosim nātrija, kā zinātnē un praksē ļoti plaši izmantota atoma spektrālīniju sērijas.

1. Galvenā (“principale”) sērija, ko veido pārejas no  $P$  līmeņiem uz līmeni  $3^2S_{1/2}$ . Šo sēriju var uzrakstīt šādi:

$$\tilde{\nu} = R \left[ \frac{1}{(3 - \Delta_s)^2} - \frac{1}{(n - \Delta_p)^2} \right] \quad (4)$$

Šīs sērijas līnijas sastāv no divām komponentēm

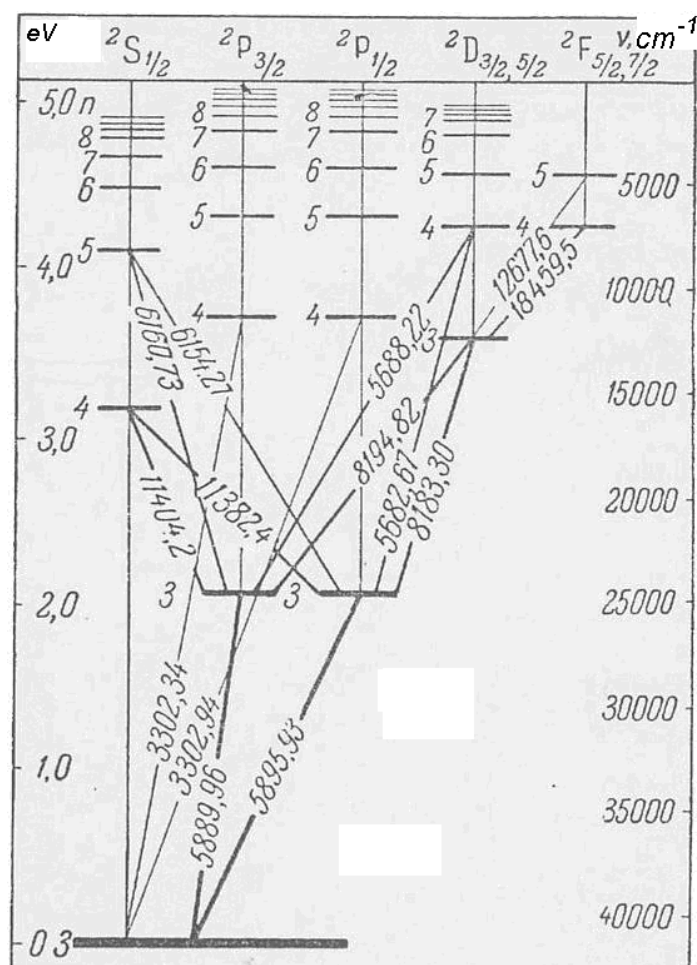
$$\begin{aligned} &3^2S_{1/2} - n^2P_{1/2} \\ &3^2S_{1/2} - n^2P_{3/2} \quad (n = 3, 4, 5, \dots) \end{aligned}$$

2. Pirmā blakus sērija jeb difūzā (“diffuse”) sērija ar izplūdušām līnijām. To veido pārejas no  $D$ -līmeņiem uz visdziļāko  $P$ -līmeni  $3^2P_{1/2, 3/2}$ .

$$\tilde{\nu} = R \left[ \frac{1}{(3 - \Delta_p)^2} - \frac{1}{(n - \Delta_d)^2} \right] \quad (5)$$

Šīs sērijas līnijas sastāv no trim komponentēm:

$$\begin{aligned} &3^2P_{1/2} - n^2D_{3/2} \\ &3^2P_{3/2} - n^2D_{3/2} \\ &3^2P_{3/2} - n^2D_{5/2} \quad (n = 3, 4, 5, \dots) \end{aligned}$$



2. att. Nātrija atoma enerģijas līmeņu shēma. Neierosināta nātrija atoma elektronu konfigurācija satur 11 elektronus, kuru izvietojumu s stacionārajos stāvokļos raksta šādi:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

3. Otrā blakus sērija jeb asā (“sharp”) sērija ar šaurām līnijām. To veido pārejas no  $S$ -līmeņiem uz visdziļāko  $P$ -līmeni  $3^2P_{1/2, 3/2}$ .

$$\tilde{\nu} = R \left[ \frac{1}{(3 - \Delta p)^2} - \frac{1}{(n - \Delta s)^2} \right] \quad (n = 4, 5, 6, \dots) \quad (6.)$$

Šīs sērijas līnijas veido dubletus:

$$\begin{aligned} &3^2P_{1/2} - n^2S_{1/2} \\ &3^2P_{3/2} - n^2S_{1/2} \end{aligned}$$

4. Bergmana sērija jeb fundamentālā (“fundamental”) sērija. To veido pārejas no  $F$ -līmeņiem uz visdziļāko  $D$ -līmeni  $3^2D_{3/2, 5/2}$ . Bergmana sērija atrodas spektra infrasarkanajā daļā.

$$\tilde{\nu} = R \left[ \frac{1}{(3 - \Delta d)^2} - \frac{1}{(n - \Delta f)^2} \right] \quad (n = 4, 5, 6, \dots) \quad (7)$$

Šīs sērijas līnijas veido trīs komponentes.

$$\begin{aligned} &3^2D_{3/2} - n^2F_{5/2} \\ &3^2D_{5/2} - n^2F_{5/2} \\ &3^2D_{5/2} - n^2F_{7/2} \end{aligned}$$

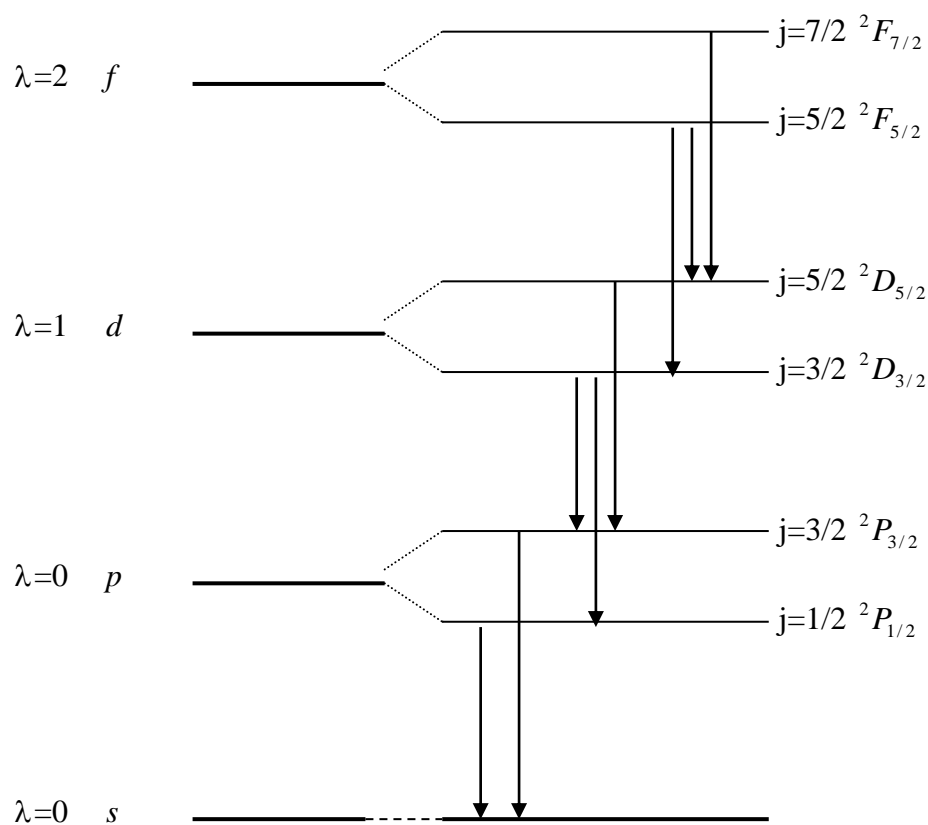


Formulās (4) - (7)  $\Delta s$ ,  $\Delta p$ ,  $\Delta d$ ,  $\Delta f$  ir kvantu defekti, kas atbilst  $\lambda$  vērtībām 0, 1, 2, 3.

Sārnu metālu atomu spektros divu sēriju līnijas sastāv no divām komponentēm – dubletiem. Arī pārējo sēriju līnijām piemīt t.s. sīkstruktūra, proti, tās veido grupas no trim līnijām. Spektru sīkstruktūras eksistence apstiprina hipotēzi par spinu.

Sārnu metālu atoma serdes elektronu orbitālie impulsa momenti un spini savstarpēji kompensējas:  $L_{\text{serdei}}=0$ ,  $S_{\text{serdei}}=0$ . Līdz ar to atoma kopējais orbitālais impulsa moments un spins vienāds ar optiskā elektrona impulsa momentu un spinu:  $L=\lambda$  un  $S=s$ . No tā izriet, ka arī kopējais kustības daudzuma moments  $J=j$ . Tā kā elektrona spins  $s=1/2$ , tad  $j=\lambda+s, \lambda+s-1, \dots, \lambda-s$ . Tātad, katrai  $\lambda$  vērtībai atbilst divas  $j$  vērtības (izņemot stāvokli, kad  $\lambda=0$ , tad  $j=s=1/2$ ). Tas nozīmē, ka visi sārnu metālu atomu enerģijas termi (izņemot  $S$ -līmeņus) ir sašķēlušies divos, kas savā starpā atšķiras ar spina orientāciju.

Atceroties izvēles likumus  $\Delta L = \pm 1$  un  $\Delta J = 0, \pm 1$ , kļūst skaidrs, kāpēc dažu sēriju līnijas – sarežģītākas grupas sastāv no trim līnijām (3. att.).



3.att. Sārnu metālu atomu termu dubletu sašķelšanās

Tā kā sārnu metālu spektrālīniju dubletu sašķelšanos nosaka elektronu orbitālā un spina momentu mijiedarbība, tad šīs šķelšanās lielumu var novērtēt arī teorētiski. Šim nolūkam ievieš papildus spin-orbitālās mijiedarbības enerģijas locekli un kodola lādiņu  $Ze$  aizstāj ar efektīvo lādiņu  $z_{ef}e$

$$z_{ef}e = (Z - a')e \quad (8)$$

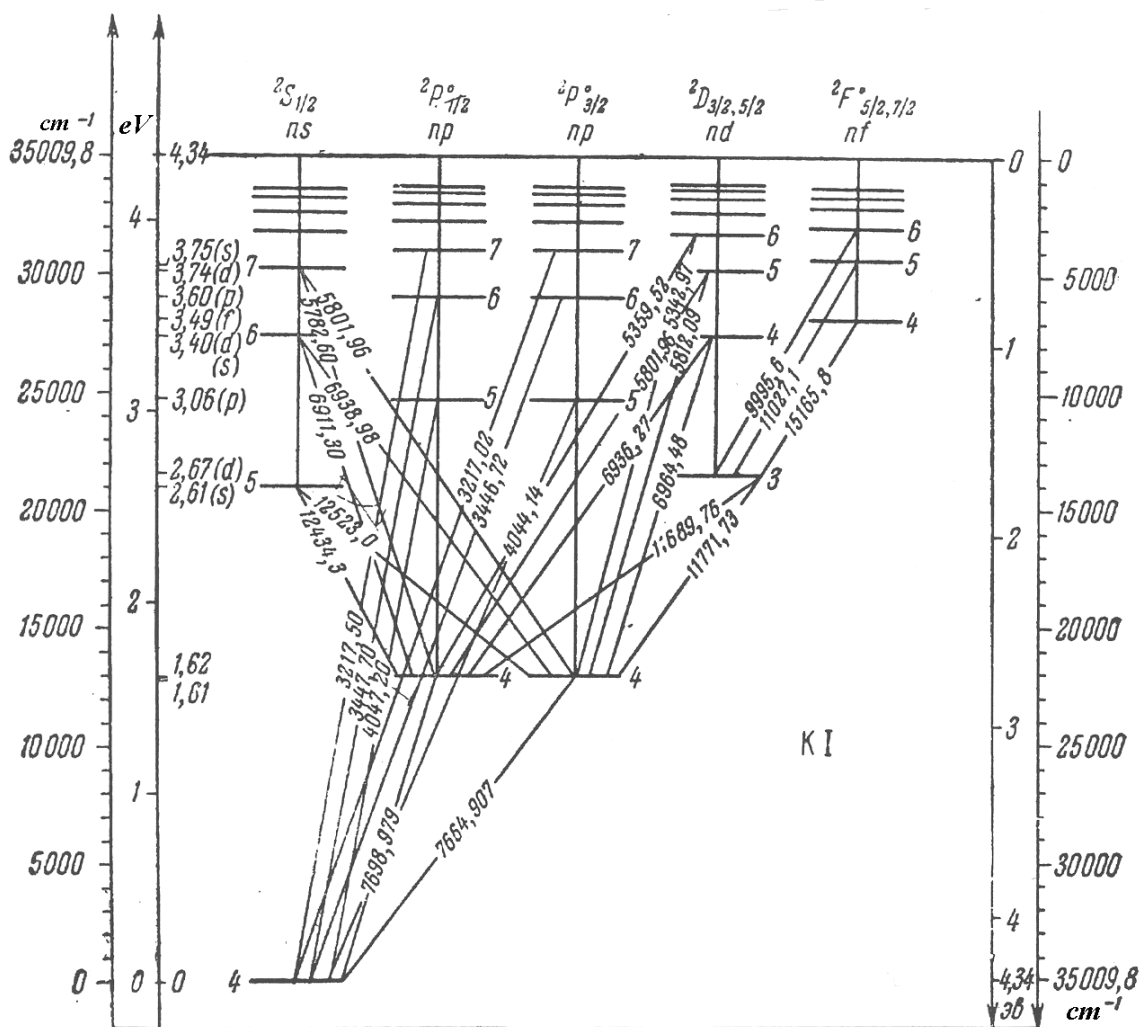
kur  $a'$  - ekranēšanas konstante,  
 $e$  - elektrona lādiņš,  
 $Z$  – elementa kārtas skaitlis ķīmisko elementu periodiskajā sistēmā.

Aprēķinu rezultātā iegūtais attālums starp diviem dubleta enerģijas līmeņiem viļņu skalā ir šāds:

$$\Delta \tilde{\nu} = 5,82 \frac{z_{ef}^4}{n^3 \lambda (\lambda + 1)} \quad (9)$$

Pēdējās divas formulas ļauj noteikt efektīvā lādiņa lielumu  $z_{ef}$ , kā arī ekranēšanas konstanti  $a'$ .

Pārējo sārņu metālu enerģijas līmeņu shēmas un spektrālo līniju sērijas ir līdzīgas nātrija līmeņu shēmām un spektru sērijām. Smagajiem elementiem tās pārbīdītas uz garo viļņu puses (kālija rezonanses līnijas 7699 un 7665 Å, cēzija – 8521,2 un 8943,6 Å).

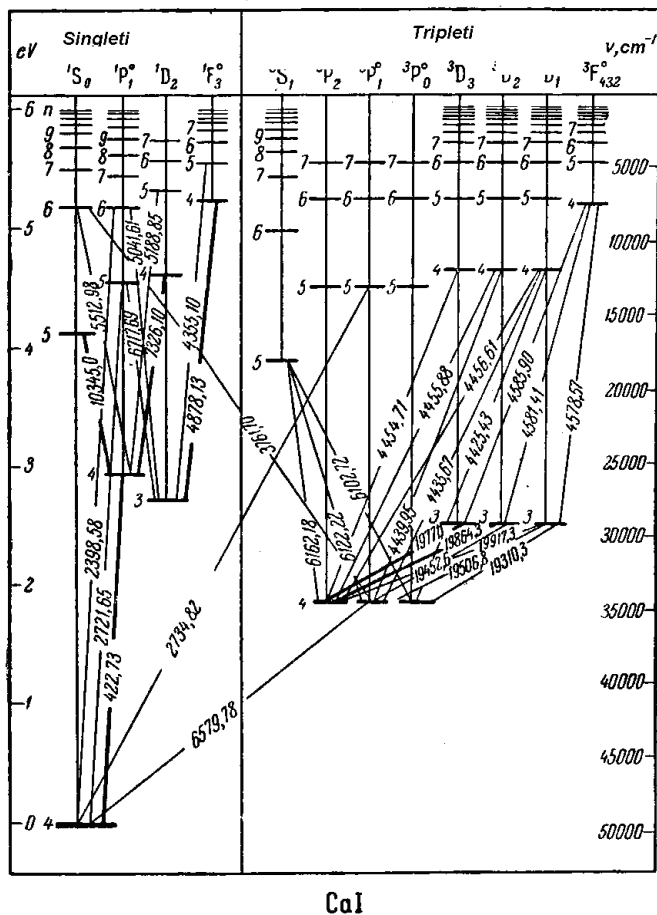


Kālija atoma enerģijas līmeņu shēma



## 5.5. Sārmzemju metālu spektri

Otrās grupas - sārmzemju metāliem (Be, Mg, Ca, Sr, Ba) spektros novēro singletu un tripletu struktūru. Tas saistīts ar diviem valences elektroniem ārējā cālā: Be 2s, Mg 3s, Ca 4s, Sr 5s, Ba 6s. Ja spinu momenti ir vērsti antiparalēli, veidojas singletu struktūra, ja paralēli – tripletu. Smago elementu spektros pārejas starp dažādu multicīplītāšu enerģijas līmeņiem nepakļaujas stingram liegumam (Ca rezonanses līnija 6579,78 Å)



Kalcija atoma enerģijas līmeņu shēma

Arī šīs grupas elementiem novērojama ievērojama enerģijas līmeņu pārbīde. Tā 3D līmeņi novietoti augstāk par 4S līmeņiem.

## 5.6 Kontroljautājumi

1. Enerģijas līmeņus atomos pilnībā raksturo ar:
  - a) 3 kvantu skaitļiem,
  - b) 4 kvantu skaitļiem,
  - c) 5 kvantu skaitļiem.
2. Asā sērija rodas kvantu pārejās:
  - a) D – P,
  - b) S – P,
  - c) P – S.
3. Difūzā sērija veidojas pārejās:
  - a) no P uz D,
  - b) no P uz S,

- c) no F uz D,
4. Galvenā līniju sērija veidojas pārejās:
- S – P,
  - D – P,
  - P – S.
5. Alumīnija veidotā spektra struktūra ir:
- dubletus,
  - singletus un tripletus,
  - dubletus un kvadrupletus.
6. Otrās grupas elementi veido:
- dubletus,
  - tripletus,
  - singletus un tripletus.
7. Kvantu skaitlis  $l$  var būt:
- 0, 1, 2 .....  $n$ ,
  - 0, 1, 2 .....  $n - 1$ ,
  - 1, 2, 3, ....  $n$
8. Alumīnija dziļākais enerģijas līmenis ir:
- $3^2 P_{1/2}$ ,
  - $3^2 P_{3/2}$ ,
  - $3^2 S_{1/2}$ .
9. Kvantu skaitlis  $J$  var pieņemt vērtības:
- $J = L + S, L + S - 1, \dots, L - S$ ,
  - $J = 0, \dots, L + S$ ,
  - $j = 1 \dots L - S$ .
10. Izvēles likumi ir:
- $\Delta n = 0, 1, 2, 3 \dots, \Delta l = +1, \Delta S = 0$ ,
  - $\Delta n = \pm 1, \Delta l = \pm 1, \Delta S = \pm 1/2$ ,
  - $\Delta n = 1, 2, 3 \dots, \Delta l = \pm 1, \Delta S = 0$ .

## 6. Pielikums 2

### 6.1. Elektronu čaulu aizpildīšanās secība.



1925. gadā šveiciešu fiziķis V. Pauli izvirzīja principu, ka atomā divas identiskas daļiņas nevar vienlaicīgi atrasties vienā kvantu stāvoklī.

<< Wolfgang Pauli (1900 – 1958)

Elektronu čaulu aizpildīšanās secīb. Zemāks ir enerģijas līmenis, kuram  $n+l$  ir ar mazāku vērtību.

Ja  $n, l$  ir vienādi, tad zemāks ir līmenis ar mazāko  $n$  vērtību.

1. periods	1s							
2. periods	2s	2p						
3. periods	3s	3p	3d					
4. periods	4s	3d	4p	4d	4f			
5. periods	5s	4d	5p	5d	5f	5g		
6. periods	6s	4f	5d	6p	6d	6f	6g	
7. periods	7s	5f	6d	7p	7d	7f	7g	.....

Ar tumšo līniju apzīmētas aizpildītās čaulas, ar punktēto – tukšās.

## 6.2. Alumīnija līniju tabula.

Alumīnija atoma ( $Z=13$ ) spektrālīnijas. Pamatstāvoklis  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2 P^0_{1/2}$ .  
Jonizācijas potenciāls  $4879,16 \text{ cm}^{-1}$ ;  $5,985 \text{ eV}$ .

$\lambda, \text{\AA}$	I rel.v.	$E_{\text{ap}}$ eV	$E_{\text{augš.}}$ eV	Pārejas apzīmējums	J
21163,75	13	4,09	4,67	$4p^2 P^0 - 5s^2 S$	3/2-1/2
21093,04	12	4,09	4,67	$4p^2 P^0 - 5s^2 S$	1/2-1/2
19727,33	18	4,99	5,62	$5p^2 P^0 - 7d^2 D$	3/2-5/2
17699,09	13	4,67	5,37	$5s^2 S - 6p^2 P^0$	1/2-3/2
16763,36	9	4,09	4,83	$4p^2 P^0 - 4d^2 D$	3/2-3/2
16750,56	12	4,09	4,83	$4p^2 P^0 - 4d^2 D$	3/2-5/2
16718,96	11	4,09	4,83	$4p^2 P^0 - 4d^2 D$	1/2-3/2
13150,76	14	3,14	4,09	$4s^2 S - 4p^2 P^0$	1/2-1/2
13123,41	15	3,14	4,09	$4s^2 S - 4p^2 P^0$	1/2-3/2
12757,26	4	4,02	4,99	$3d^2 D - 5p^2 P^0$	3/2-1/2
12749,83	21	4,02	4,99	$3d^2 D - 5p^2 P^0$	5/2-3/2
12747,65	2	4,02	4,99	$3d^2 D - 5p^2 P^0$	3/2-3/2
11254,881	15	4,02	5,12	$3d^2 D - 4f^2 F^0$	5/2-7/2
11253,190	14	4,02	5,12	$3d^2 D - 4f^2 F^0$	3/2-5/2
10891,733	11	4,09	5,22	$4p^2 P^0 - 6s^2 S$	3/2-1/2
10872,975	10	4,09	5,22	$4p^2 P^0 - 6s^2 S$	1/2-1/2
10786,770	4	4,09	5,24	$4p^2 P^0 - 5d^2 D$	3/2-3/2
10782,045	9	4,09	5,24	$4p^2 P^0 - 5d^2 D$	3/2-5/2
10768,364	8	4,09	5,24	$4p^2 P^0 - 5d^2 D$	1/2-3/2
9172,14	4	4,02	5,37	$3d^2 D - 6p^2 P^0$	3/2-1/2
9170,86	5	4,02	5,37	$3d^2 D - 6p^2 P^0$	5/2-3/2
9163,261	2	7,03	8,39	$3p^2 \text{ } ^2P - 3d^2 D^0$	3/2-3/2
9139,950	6	7,03	8,39	$3p^2 \text{ } ^2P - 3d^2 D^0$	3/2-5/2
9089,906	5	7,02	8,39	$3p^2 \text{ } ^2P - 3d^2 D^0$	1/2-3/2
8925,504	4	4,09	5,48	$4p^2 P^0 - 6d^2 D$	3/2-3/2
8923,555	9	4,09	5,48	$4p^2 P^0 - 6d^2 D$	3/2-5/2
8912,900	7	4,09	5,48	$4p^2 P^0 - 6d^2 D$	1/2-3/2
8841,277	10	4,09	5,49	$4p^2 P^0 - 7s^2 S$	3/2-1/2

8828,909	8	4,09	5,49	$4p^2P^0-7s^2S$	1/2-1/2
8773,896	14	4,02	5,43	$3d^2D-5f^2F^0$	5/2-7/2
8772,866	13	4,02	5,43	$3d^2D-5f^2F^0$	3/2-5/2
8076,298	2	4,09	5,62	$4p^2P^0-7d^2D$	3/2-3/2
8075,353	8	4,09	5,62	$4p^2P^0-7d^2D$	3/2-5/2
8065,968	6	4,09	5,62	$4p^2P^0-7d^2D$	1/2-3/2
8003,186	7	4,09	5,64	$4p^2P^0-8s^2S$	3/2-1/2
7993,048	5	4,09	5,64	$4p^2P^0-8s^2S$	1/2-1/2
7836,134	12	4,02	5,60	$3d^2D-6f^2F^0$	5/2-5/2,7/2
7615,339	1	4,09	5,71	$4p^2P^0-8d^2D$	3/2-3/2
7614,820	7	4,09	5,71	$4p^2P^0-8d^2D$	3/2-5/2
7606,159	5	4,09	5,71	$4p^2P^0-8d^2D$	1/2-3/2
7563,214	3	4,09	5,72	$4p^2P^0-9s^2S$	3/2-1/2
7554,162	1	4,09	5,72	$4p^2P^0-9s^2S$	1/2-1/2

$\lambda, \text{\AA}$	I rel.v.	$E_{ap}$ eV	$E_{aug.}$ eV	Pārejas apzīmējums	J
7362,297	9	4,02	5,70	$3d^2D-7f^2F^0$	5/2-5/2
7361,568	8	4,02	5,70	$3d^2D-7f^2F^0$	3/2-5/2
7084,644	6	4,02	5,77	$3d^2D-8f^2F^0$	5/2-5/2
7083,968	5	4,02	5,77	$3d^2D-8f^2F^0$	3/2-5/2
6698,673	11	3,14	4,99	$4s^2S-5p^2P^0$	1/2-1/2
6696,023	13	3,14	4,99	$4s^2S-5p^2P^0$	1/2-3/2
5557,948	8	3,14	5,37	$4s^2S-6p^2P^0$	1/2-1/2
5557,063	10	3,14	5,37	$4s^2S-6p^2P^0$	1/2-3/2
5107,943	4	3,14	5,57	$4s^2S-7p^2P^0$	1/2-1/2
5107,520	6	3,14	5,57	$4s^2S-7p^2P^0$	1/2-3/2
3961,5200	26	0,01	3,14	$3p^2P^0-4s^2S$	3/2-1/2
3944,0058	24	0,00	3,14	$3p^2P^0-4s^2S$	1/2-1/2
3935,677	4	5,24	8,39	$5d^2D-3d^2D^0$	3/2-3/2
3931,996	5	5,24	8,39	$5d^2D-3d^2D^0$	5/2-5/2
3482,628	5	4,83	8,39	$4d^2D-3d^2D^0$	3/2-3/2
3479,806	5	4,83	8,39	$4d^2D-3d^2D^0$	5/2-5/2
3458,216	6	0,01	3,60	$3p^2P^0-3p^2^4P$	3/2-1/2
3452,657	2	0,01	3,60	$3p^2P^0-3p^2^4P$	3/2-3/2
3444,865	6	0,00	3,60	$3p^2P^0-3p^2^4P$	1/2-1/2
3443,640	9	0,01	3,61	$3p^2P^0-3p^2^4P$	3/2-5/2
3439,347	6	0,00	3,60	$3p^2P^0-3p^2^4P$	1/2-3/2
3092,8386	20	0,01	4,02	$3p^2P^0-3d^2D$	3/2-3/2
3092,7099	26	0,01	4,02	$3p^2P^0-3d^2D$	3/2-5/2
3082,1529	24	0,00	4,02	$3p^2P^0-3d^2D$	1/2-3/2
3066,145	5	3,61	7,66	$3p^2^4P-4s^4P^0$	5/2-3/2
3064,290	7	3,60	7,65	$3p^2^4P-4s^4P^0$	3/2-1/2
3059,924	4	3,60	7,65	$3p^2^4P-4s^4P^0$	1/2-1/2
3059,029	4	3,60	7,66	$3p^2^4P-4s^4P^0$	3/2-3/2
3057,144	14	3,61	7,67	$3p^2^4P-4s^4P^0$	5/2-5/2
3054,679	5	3,60	7,66	$3p^2^4P-4s^4P^0$	1/2-3/2
3050,073	13	3,60	7,67	$3p^2^4P-4s^4P^0$	3/2-5/2
2913,267	3	5,24	9,49	$5d^2D-4d^2P^0$	5/2-5/2

2902,258	2	5,48	9,75	6d <sup>2</sup> D-6s <sup>2</sup> P <sup>0</sup>	3/2-5/2
2894,228	3	5,48	9,76	6d <sup>2</sup> D-6s <sup>2</sup> P <sup>0</sup>	5/2-7/2
2840,205	2	4,02	8,39	3d <sup>2</sup> D-3d <sup>2</sup> D <sup>0</sup>	5/2-3/2
2840,099	7	4,02	8,39	3d <sup>2</sup> D-3d <sup>2</sup> D <sup>0</sup>	3/2-3/2
2837,963	7	4,02	8,39	3d <sup>2</sup> D-3d <sup>2</sup> D <sup>0</sup>	5/2-5/2
2837,856	2	4,02	8,39	3d <sup>2</sup> D-3d <sup>2</sup> D <sup>0</sup>	3/2-5/2
2748,065	3	5,24	9,75	5d <sup>2</sup> D-6s <sup>2</sup> P <sup>0</sup>	3/2-5/2
2740,980	4	5,24	9,76	5d <sup>2</sup> D-6s <sup>2</sup> P <sup>0</sup>	5/2-7/2
2660,386	12	0,01	4,67	3p <sup>2</sup> P <sup>0</sup> -5s <sup>2</sup> S	3/2-1/2
2657,406	3	4,83	9,49	4d <sup>2</sup> D-4d <sup>2</sup> P <sup>0</sup>	5/2-5/2
2652,475	12	0,00	4,67	3p <sup>2</sup> P <sup>0</sup> -5s <sup>2</sup> S	1/2-1/2
2575,397	8	0,01	4,83	3p <sup>2</sup> P <sup>0</sup> -4d <sup>2</sup> D	3/2-3/2
2575,095	10	0,01	4,83	3p <sup>2</sup> P <sup>0</sup> -4d <sup>2</sup> D	3/2-5/2
2567,983	10	0,00	4,83	3p <sup>2</sup> P <sup>0</sup> -4d <sup>2</sup> D	1/2-3/2

$\lambda$ , Å	I rel.v.	E <sub>ap</sub> eV	E <sub>augš.</sub> eV	Pārejas apzīmējums	J
2519,514	1	4,83	9,75	4d <sup>2</sup> D-6s <sup>2</sup> P <sup>0</sup>	5/2-5/2
2519,222	4	4,83	9,75	4d <sup>2</sup> D-6s <sup>2</sup> P <sup>0</sup>	3/2-5/2
2513,305	5	4,83	9,76	4d <sup>2</sup> D-6s <sup>2</sup> P <sup>0</sup>	5/2-7/2
2378,395	7	0,01	5,22	3p <sup>2</sup> P <sup>0</sup> -6s <sup>2</sup> S	3/2-1/2
2374,496	4	3,61	8,83	3p <sup>2</sup> 4P-3d <sup>4</sup> D <sup>0</sup>	5/2-3/2
2373,571	8	3,61	8,83	3p <sup>2</sup> 4P-3d <sup>4</sup> D <sup>0</sup>	5/2-5/2
2373,351	15	0,01	5,24	3p <sup>2</sup> P <sup>0</sup> -5d <sup>2</sup> D	3/2-3/2
2373,122	7	0,01	5,24	3p <sup>2</sup> P <sup>0</sup> -5d <sup>2</sup> D	3/2-5/2
2372,070	5	0,01	5,22	3p <sup>2</sup> P <sup>0</sup> -6s <sup>2</sup> S	1/2-1/2
2372,070	10	3,61	8,84	3p <sup>2</sup> 4P-3d <sup>4</sup> D <sup>0</sup>	5/2-7/2
2370,726	6	3,60	8,83	3p <sup>2</sup> 4P-3d <sup>4</sup> D <sup>0</sup>	3/2-1/2
2370,225	9	3,60	8,83	3p <sup>2</sup> 4P-3d <sup>4</sup> D <sup>0</sup>	3/2-3/2
2369,304	10	3,60	8,83	3p <sup>2</sup> 4P-3d <sup>4</sup> D <sup>0</sup>	3/2-5/2
2368,112	8	3,60	8,83	3p <sup>2</sup> 4P-3d <sup>4</sup> D <sup>0</sup>	1/2-1/2
2367,611	8	3,60	8,83	3p <sup>2</sup> 4P-3d <sup>4</sup> D <sup>0</sup>	1/2-3/2
2367,053	6	0,00	5,24	3p <sup>2</sup> P <sup>0</sup> -5d <sup>2</sup> D	1/2-3/2
2321,562	9	3,61	8,95	3p <sup>2</sup> 4P-3d <sup>4</sup> P <sup>0</sup>	5/2-5/2
2319,057	5	3,61	8,96	3p <sup>2</sup> 4P-3d <sup>4</sup> P <sup>0</sup>	5/2-3/2
2317,482	7	3,60	8,95	3p <sup>2</sup> 4P-3d <sup>4</sup> P <sup>0</sup>	3/2-5/2
2314,983	4	3,60	8,96	3p <sup>2</sup> 4P-3d <sup>4</sup> P <sup>0</sup>	3/2-3/2
2313,526	6	3,60	8,96	3p <sup>2</sup> 4P-3d <sup>4</sup> P <sup>0</sup>	3/2-1/2
2312,491	5	3,60	8,96	3p <sup>2</sup> 4P-3d <sup>4</sup> P <sup>0</sup>	1/2-3/2
2311,035	4	3,60	8,96	3p <sup>2</sup> 4P-3d <sup>4</sup> P <sup>0</sup>	1/2-1/2
2269,222	1	0,01	5,48	3p <sup>2</sup> P <sup>0</sup> -6d <sup>2</sup> D	3/2-3/2
2269,096	7	0,01	5,48	3p <sup>2</sup> D-6d <sup>2</sup> D <sup>0</sup>	3/2-5/2
2266,014	3	4,02	9,49	3d <sup>2</sup> D-4d <sup>2</sup> P <sup>0</sup>	5/2-5/2
2263,738	1	0,01	5,49	3p <sup>2</sup> P <sup>0</sup> -7s <sup>2</sup> S	3/2-1/2
2263,463	7	0,00	5,48	3p <sup>2</sup> P <sup>0</sup> -6d <sup>2</sup> D	1/2-3/2
2258,008	1	0,00	5,49	3p <sup>2</sup> P <sup>0</sup> -7s <sup>2</sup> S	1/2-1/2
2210,060	2	0,01	5,62	3p <sup>2</sup> P <sup>0</sup> -7d <sup>2</sup> D	3/2-3/2,5/2
2204,668	1	0,00	5,62	3p <sup>2</sup> P <sup>0</sup> -7d <sup>2</sup> D	1/2-3/2
		0,01	5,64	3p <sup>2</sup> P <sup>0</sup> -8s <sup>2</sup> S	3/2-1/2

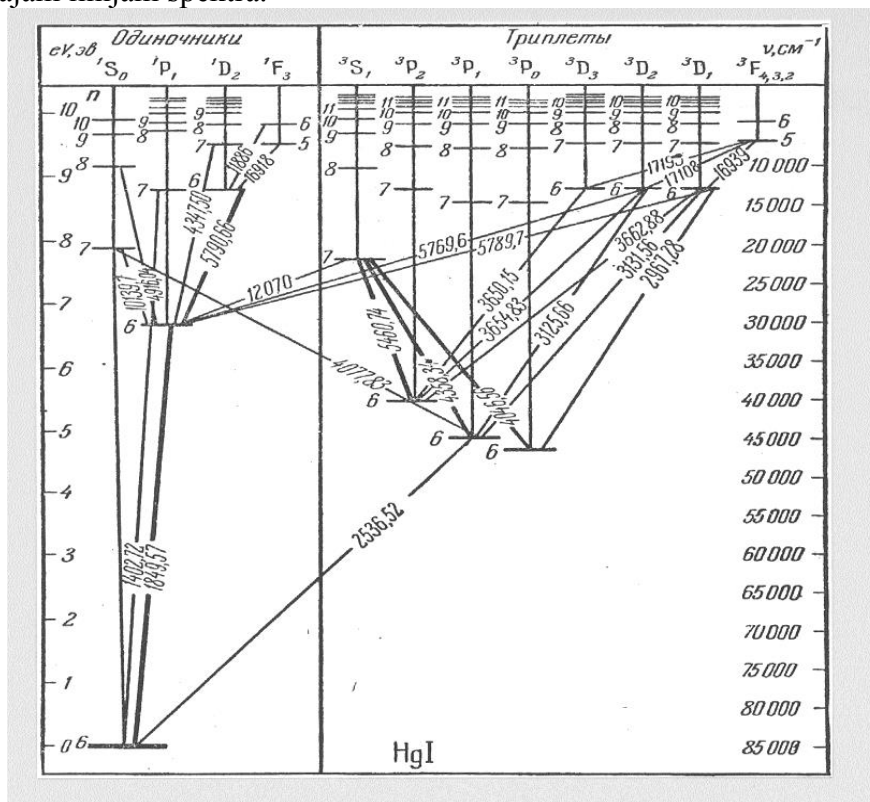


2199,183	1	0,01	5,64	$3p^2P^0-8s^2S$	1/2-1/2
2180,996	8	3,14	8,82	$4s^2S-3d^2P^0$	1/2-3/2
2177,396	6	3,14	8,83	$4s^2S-3d^2P^0$	1/2-1/2
2174,071	2	0,01	5,71	$3p^2P^0-8d^2D$	3/2-3/2,5/2
2168,826	2	0,00	5,71	$3p^2P^0-8d^2D$	1/2-3/2
2164,915	2	4,02	9,75	$3d^2D-6s^2P^0$	3/2-5/2
2160,388	3	4,02	9,76	$3d^2D-6s^2P^0$	5/2-7/2
2150,699	5	0,01	5,78	$3p^2P^0-9d^2D$	3/2-5/2
2145,555	3	0,00	5,78	$3p^2P^0-9d^2D$	1/2-3/2
2134,733	2	0,01	5,82	$3p^2P^0-10d^2D$	3/2-5/2
2129,663	1	0,00	5,82	$3p^2P^0-10d^2D$	1/2-3/2
2123,362	1	0,01	5,85	$3p^2P^0-11d^2D$	3/2-5/2
1769,140	4	0,01	7,02	$3p^2P^0-3p^2P$	3/2-1/2
1766,385	4	0,01	7,03	$3p^2P^0-3p^2P$	3/2-3/2

$\lambda, \text{\AA}$	I	$E_{\text{ap}}$ rel.v.	$E_{\text{augš.}}$ eV	Pārejas apzīmējums	J
1765,636	4	0,00	7,02	$3p^2P^0-3p^2P$	1/2-1/2
1762,899	2	0,00	7,03	$3p^2P^0-3p^2P$	1/2-3/2

### 6. 3. Dzīvsudraba atoma enerģijas līmeņu shēma

Dzīvsudrabs ir periodiskās sistēmas 80 elements ar daļēji aizpildītu 5. čaulu. Ārējie elektroni pieder 6s čaulai (neaizpildītas 5d, 5f, 5g čaulas). Spektros pārstāvētas singletu un tripletu struktūras. Rezonanses līnija 2536,52 Å (aizliegums attiecībā pret multiplicitāti) ir viena no spožākajām līnijām spektrā.



Dzīvsudraba atoma enerģijas līmeņu shēma

## 6.4. Periodiskās sistēmas elementu elektronu čaulas struktūra

*Aizpildītās čaulas nav atspoguļotas*

## 6.5. No spina atklāšanas vēstures

Energijas līmeņu sašķelšanās cēloņus izdevās atklāt tikai 1925. gadā. Un to izdarīja amerikāņu fiziķi Džordžs Judžins Ulenbeks (1900-1988) un Semjuels Abrahams Gaudsmits (1902-1979), kuri izvirzīja elektrona kustības daudzuma momenta un tam atbilstoša magnētiskā momenta hipotēzi. Viņi parādīja, ka grūtības var pārvarēt, ja elektronam bez masas un lādiņa piedēvē vēl vienu specifisku īpašību – spinu, kuru raksturo kvantu skaitlis  $s = 1/2$ . Nosaukums cēlies no angļu vārda *spin* – griezties. Spinu var iedomāties kā kustības daudzuma momentu, kas saistīts ar elektrona rotāciju ap savu asi. Elektrona rotācija savukārt izraisa spina magnētisko lauku. Spina magnētiskais lauks mijiedarbojās ar elektrona orbitālās kustības izraisīto magnētisko lauku. Tās rezultātā spina moments var pieņemt divus stāvokļus attiecībā pret orbitālās kustības magnētisko lauku: paralēli un antiparalēli tam. Tā ir kvantu fizikas specifika. (Atcerēsimies, ka kompasa magnētadata Zemes magnētiskajā laukā var pieņemt tikai vienu stāvokli). Pateicoties divām magnētiskā momenta orientācijām, arī mehāniskais moments pieņem divas skaitliskās vērtības:  $\hbar/2\pi$  un  $-\hbar/2\pi$ .



Džordžs Ulenbeks (1900-1988)   Semjuels Gaudsmits (1902-1979),   Nils Bors un Otto Šterns (1888-1969)

Spina hipotēze pavēra iespējas noskaidrot ļoti daudzus faktus. Tajā skaitā pirmās grupas elementu spektrālo līniju dubulto struktūru. Piemēram, nātrija dzeltenā rezonanses līnija sašķēlas divās komponentēs ( $5889,953 \text{ \AA}$  un  $5895,930 \text{ \AA}$ ), kuru viļņu garuma starpība ir  $6 \text{ \AA}$ . Pieaugot masas skaitlim, sašķelšanās palielinās. Cēzija rezonanses līnija sašķēlas komponentēs, kuru viļņu garumu starpība jau ir  $422 \text{ \AA}$ .

Šo sašķelšanos var uzskatāmi izskaidrot no Ulenbeka un Gaudsmita hipotēzes viedokļa. Kvantu stāvokļiem, kuriem  $l > 0$ , spina moments vektoriāli summējās ar orbitālo momentu. Tā rezultātā enerģijas līmeņi sašķēlas divos apakšlīmeņos, kurus raksturo iekšējais kvantu skaitlis  $j$ , un tas var pieņemt divas vērtības:  $l + s$  un  $l - s$ . Gadījumā, kad  $l = 1$ , iegūstam  $j = 1/2, 3/2$ . Šie kvantu skaitļi raksturo  $p$  līmeņus. Ja  $l = 2$ , tad  $j = 3/2, 5/2$  ( $d$  līmeņi) u.t.t. Izņēmums ir gadījums, kad  $l = 0$ , tad enerģijas līmeņi nav sašķelti ( $s$  līmeņi), jo neveidojas elektrona orbitālais lauks, attiecībā pret kuru varētu orientēties elektrona rotācijas (spina) izraisītais magnētiskais lauks.

Enerģijas līmeņi, kuri veidojās, ja spina un orbitālais magnētiskais lauks vērsti vienā virzienā, novietoti augstāk; savukārt, ja lauku orientācija ir pretēja, enerģijas līmeņi novietoti zemāk. Ulenbeka-Gaudsmita hipotēze labi izskaidro arī to elementu atomu spektrus, kuru elektronu konfigurācija ir komplicētāka. Šie atomi dod tripletu, kvadrupletu un augstākas multiplicitātes spektrus.

Priekšstatu par elektrona spinu un ar to saistītās īpašības Ulenbeks un Gaudsmits izvirzīja kā hipotēzi. Vēlāk izrādījās, ka spina pastāvēšana un no tā izrietošās īpašības automātiski iegūst no Dīraka izstrādātās relativistiskās kvantu fizikas.

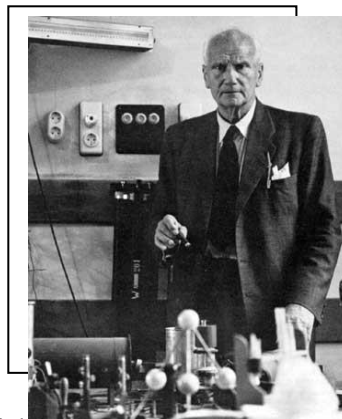
Pastarpināti spina iespaids izpaužas optiskā spektra struktūrā. Eksperimentāli Ulenbeka un Gaudsmita hipotēzi 1922. gadā pierādīja vācu fiziķi Otto Šterns (1888-1969) un Valters Gerlahs (1889-1979), veicot eksperimentu ārējā magnētiskajā laukā. Šim nolūkam vispiemērojamākie ir ūdeņraža atomi vai periodiskās sistēmas pirmās grupas metālu atomi. To ārējā čaulā ir viens elektrons un neierosinātā stāvoklī tiem nav orbitālais magnētiskais lauks.

Ja izdotos eksperimentāli pierādīt, ka šiem atomiem ir mehāniskais un magnētiskais moments, tad tas jāpiedēvē valences elektronam.

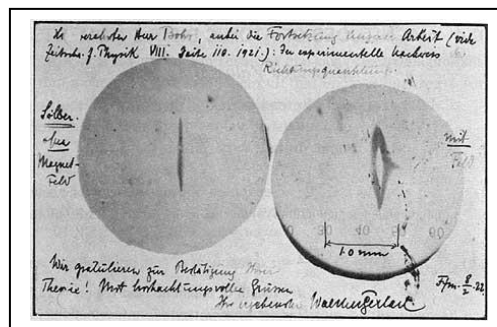
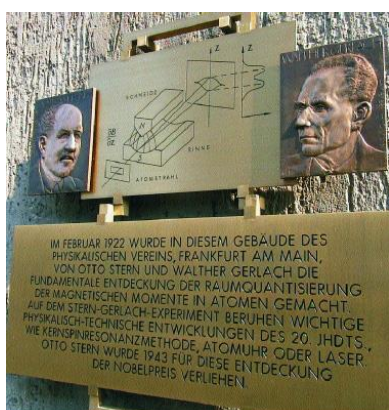


Otto Šterns (1888-1969)  
Valters Gerlahs (1889-1979)

>>



Ja atomu kūlītis šķērso viendabīgu magnētisko lauku, tad atomārie dipoli šajā laukā orientējās noteiktā virzienā, taču kūlīša konfigurācija nemainās. Citādi tas ir nehomogēnā laukā. Ja lauka nevienādība ir dipola izmēra ( $10^{-8}$  cm) robežās, tad uz dipola poliem darbojas atšķirīgi spēki un atomi pārvirzīsies atkarībā no spina orientācijas ārējā lauka vai tam pretējā virzienā.



Attēls no Gerlaha vēstules Boram 1922. gadā

<< Oto Sterna un Valtera Gerlaha piemiņai veltītā plāksne atklāta 2002. gadā pie mājas, kur 1922. gadā tika izdarīts eksperiments, iejas. Plāksnē attēlota eksperimenta shēma

Šterns un Gerlahs eksperimentēja ar sudraba atomiem. Ar speciālu diafragmu palīdzību vakuumā formēja šauru sudraba tvaiku kūlīti, kurš pēc tam šķērsoja nevienādīgu magnētisko lauku. To ieguva ar speciālas formas magnēta poliem. Uz plāksnītes, kas bija novietota perpendikulāri kūlītim ieguva divas sudraba atomu joslas. Eksperimentu atkārtoja ar ūdeņradi, litiju u.c. elementiem. Atkarībā no kūļa sašķelšanos, lauka stipruma un konfigurācijas var aprēķināt elektrona magnētisko momentu (Bora magnetonu):

$$\mu_B = eh/4\pi mc.$$

Līdzīgu eksperimentu gadu agrāk bija iecerējuši veikt Pjotrs Kapica un Nikolajs Semjonovs (1896- ? ), taču ar eksperimenta realizēšanu aizkavējās.

## References

- <sup>1</sup> W. Pauli, *Z. Physik* **31**, 373 (1925).
- <sup>2</sup> N. Bohr, *Ann. Physik* **71**, 228 (1923); especially p. 276.
- <sup>3</sup> W. Heisenberg and A. Landé, *Z. Physik* **25**, 279 (1924).
- <sup>4</sup> A. Landé, *Ann. Physik* **76**, 273 (1925); see especially section 2.
- <sup>5</sup> See N. Bohr, *Drei Aufsätze über Spektren und Atombau*, Brunswick, 1924.
- <sup>6</sup> E. C. Stoner, *Phil. Mag.* **48**, 719 (1924).
- <sup>7</sup> V. Thorsen, *Naturwiss.* **11**, 78 (1923); W. Grotrian, *Z. Physik* **18**, 169 (1923).
- <sup>8</sup> J. J. Hopfield, *Ap. J.* **58**, 114 (1924); O. Laporte, *Naturwiss.* **12**, 598 (1924).

## 7. Literatūra

1. Практикум по спектроскопии. Под ред. Л.В.Левшна.-М.: изд. Московского университета, 1976.-с.50.-66.
2. Фриш С.Э. Оптические спектры атомов.-М.:Л. Изд. Физ.-мат.лит., 1963.-640 с.
3. Atomfizikas praktikums. V. Rēvalda redakcijā. LVU., 1987. -98 lpp.