

КВАНТОВАЯ ФИЗИКА

Семинар №10

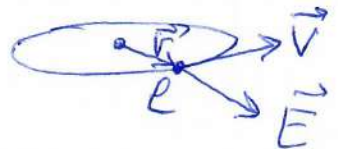
Сложные атомы. Тонкая и сверхтонкая структуры. Эффект Зеемана.

Точная структура атома водорода

Спин-орбитальное взаимодействие - взаимодействие спинового магнитного момента с магнитным полем, возникающим в системе отсчёта электрона из-за его движения в электростатическом поле ядра.

Энергия спин-орбитального взаимодействия для 1-й бортовой орбиты атома водорода:
 $E_{se} \sim \alpha^2 R_1$, где $R_1 = 13,6 \text{ эВ}$ - энергия Ридберга

$$\frac{mv^2}{2} = E - U = E + \frac{e^2}{r_1} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} + \frac{e^2 me^2}{\hbar^2} = \frac{me^4}{2\hbar^2}$$
$$\Rightarrow v = \frac{e^2}{\hbar} = \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right) \cdot c = \alpha c \quad (1')$$



В системе отсчёта электрона: $\vec{E}' = \vec{E}$

$\vec{B}' = -\frac{1}{c} [\vec{v}, \vec{E}] = \frac{1}{c} [\vec{E}, \vec{v}]$, где \vec{v} - скорость электрона

$$B' = \frac{EV}{c} \stackrel{(1')}{=} \alpha E = \alpha \frac{e}{r_1^2} = \frac{\alpha m^2 e^5}{\hbar^4} \quad (2')$$

$$E_{se} \sim \mu_B B' \stackrel{(2')}{=} \frac{e\hbar}{2mc} \cdot \frac{\alpha m^2 e^5}{\hbar^4} = \alpha \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right) \frac{me^4}{2\hbar^2} = \alpha^2 R_1$$

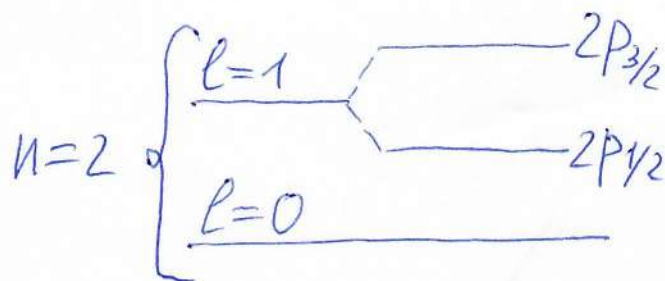
Спин-орбитальное взаимодействие приводит к тонкой структуре уровней - расщеплению энергетических уровней.

Энергия спин-орбитального взаимодействия $\sim Z^4$. Для лёгких атомов тонкое расщепление $\lesssim 10^{-5} \text{ эВ}$

Для тяжёлых атомов тонкое расщепление $\lesssim 0,1 \text{ эВ}$

Пример

Точная структура
уровней с $n=2$ в
многоэлектронном атоме



Еще один релятивистский эффект — зависимость массы электрона от скорости. Это того же порядка малости, что и спин-орбитальное взаимодействие.

Замечание.

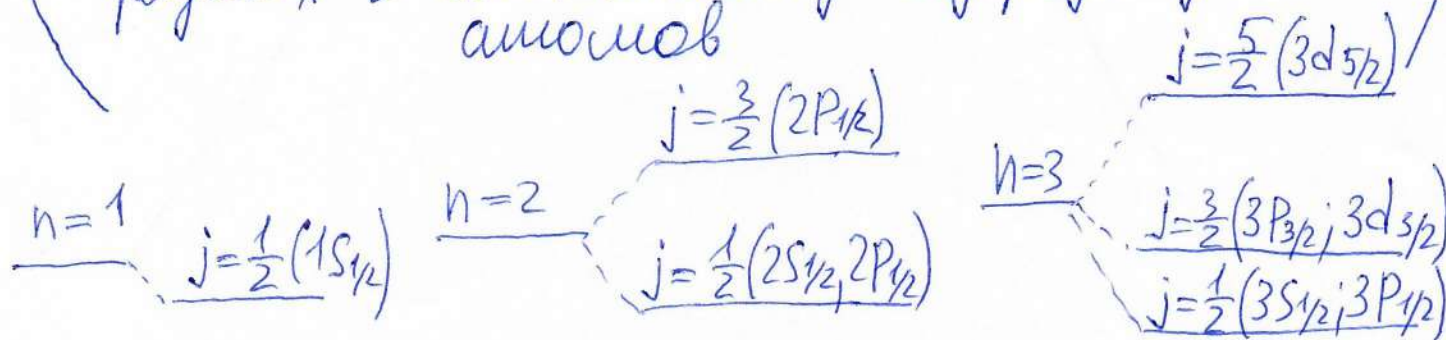
- 1) Спин-орбитальное взаимодействие в водородоподобных атомах снижает вырождение по квантовому числу l .
- 2) Энергии уровней водородоподобных атомов с учетом спин-орбитального взаимодействия и зависимости массы электрона от скорости:

$$E_{nj} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2} \left[1 + \frac{Z^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

где $\mu = \frac{mM}{m+M}$ — приведенная масса

Z — номер ядра

(Совпадение уровней с одинаковыми n и j при разных l есть только у водородоподобных атомов)



3) Есть еще сверхтонкая структура (из-за взаимодействия магнитного момента электрона с магнитным моментом ядра) и Лэмбовский сдвиг (слабое расщепление уровней с одинаковым j у водородоподобных атомов из-за взаимодействия электрона с флуктуацией электромагнитного поля - "флуктуацией вакуума").

Лэмбовский сдвиг означает вырождение по квантовому числу j в водородоподобных атомах. (В других атомах это вырождение снимается уже в результате отталкивания от нулевого).

Многоэлектронные атомы

Типы связи электронов в атомах

① Нормальная связь (связь Рассела - Саундерса)

Для лёгких и средних атомов орбитальные моменты электронов взаимодействуют между собой сильнее, чем со спиновыми моментами. Аналогично ведут себя и спиновые моменты



Все орбитальные моменты складываются в суммарный орбитальный момент $\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i$, а спиновые в суммарный спиновый момент $\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i$

Полный угловой момент: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

$$|\vec{J}| = \hbar \sqrt{J(J+1)} \quad |L-S| \leq J \leq L+S$$

$$\boxed{J_z = \hbar m_J} \quad m_J = J, J-1, \dots, -J$$

где J — квантовое число полного углового момента атома.

Замечание. В векторной модели можно представить, что вектора \vec{L} и \vec{S} вращаются вокруг постоянного вектора \vec{J} .

② J-J связь

Для тяжелых атомов сильное орбитальное взаимодействие у каждого электрона является преобладающим \Rightarrow Полный угловой момент:

$$\vec{J} = \sum \vec{J}_i$$

где \vec{J}_i — полный угловой момент i -го электрона.

③ Связь промежуточного типа. Данный тип связи наиболее сложен для теоретического описания.

Для всех типов связи применяемые обозначения $^{2S+1}L_J$

L — орбитальное квантовое число атома

S — спиновое квантовое число атома

J — квантовое число полного углового момента атома.

квантовое число L	0	1	2	3
символ состояния	S	P	D	F

$(2S+1)$ – мультиплетность

При $S < L$ мультиплетность равна числу подуровней

При $S > L$ число подуровней равно $(2L+1)$

Правила отбора. Для электрических дипольных переходов возможны импульсные переходы, при которых:

$$\Delta J = 0; \pm 1 \text{ (кроме случаев } J_{\text{нач}} = J_{\text{кон}} = 0)$$

$$\Delta M_J = 0; \pm 1$$

$$\Delta L = 0, \pm 1 \text{ (кроме случаев } L_{\text{нач}} = L_{\text{кон}} = 0)$$

$$\Delta M_L = 0, \pm 1$$

$$\Delta S = 0$$

$$\Delta M_S = 0$$

Замечание. 1) Переходы с $\Delta L = 0$ невозможны для атомов, в которых излучение фотона связано с изменением движения только одного электрона (в водородоподобных атомах, атомах щелочных металлов).

2) При $\Delta M_J = \pm 1$ вдоль оси z излучающие фотоны с круговой поляризацией.

При $\Delta M_J = 0$ вдоль оси z фотоны не излучающие

При $\Delta m_y = 0, \pm 1$ перпендикулярно оси z излучающие фотоны с неопределённой проекцией углового момента на направление их распространения y (фотоны в состоянии суперпозиции с $j_y = +\hbar$ и $j_y = -\hbar$). При этом будет линейная поляризация, а при циркулярной j_y две фотона будут получать значения $+\hbar$ и $-\hbar$ с равной вероятностью.

Принцип Паули. Заполнение электронных оболочек

Квантовое состояние электрона в атоме определяется набором четырёх квантовых чисел, например: n, l, m_l, m_s или n, l, j, m_j .

Принцип Паули. В любом квантовом состоянии может находиться не более одного электрона.

Принцип Паули справедлив не только для электронов в атоме, но и для всех электронов во Вселенной. При этом состояния электронов могут отличаться как по энергии, так и по пространственному распределению. Каждому состоянию соответствует однократная волновая функция: ψ_1, ψ_2 и т.д.

Волновые функции двух невзаимодействующих частиц, одна из которых в состоянии ψ_1 , а другая в состоянии ψ_2 :

$$\Psi_1(\vec{r}_1, S_{1z}, \vec{r}_2, S_{2z}) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_\alpha(\vec{r}_1, S_{1z}) \Psi_\beta(\vec{r}_2, S_{2z}) - \Psi_\alpha(\vec{r}_2, S_{2z}) \Psi_\beta(\vec{r}_1, S_{1z})] \quad (1)$$

$$\Psi_2(\vec{r}_1, S_{1z}, \vec{r}_2, S_{2z}) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_\alpha(\vec{r}_1, S_{1z}) \Psi_\beta(\vec{r}_2, S_{2z}) + \Psi_\alpha(\vec{r}_2, S_{2z}) \Psi_\beta(\vec{r}_1, S_{1z})] \quad (2)$$

где \vec{r}_1, S_{1z} — координаты и проекция спина 1-й частицы

\vec{r}_2, S_{2z} — координаты и проекция спина 2-й частицы

Замечание. Нормировочный множитель вообще говоря отличается от $1/\sqrt{2}$ тем больше, чем больше перекрываются одночастичные волновые функции частиц (см. Гольдш (11.17))

Фермионы — частицы, обладающие полуцелым спином, подчиняющиеся принципу Паули и описываемые антисимметричными волновыми функциями (1) (электроны, протоны, нейтроны; частицы, состоящие из нечётного числа фермионов).

Бозоны — частицы, обладающие целым спином, не подчиняющиеся принципу Паули и описываемые симметричными волновыми функциями (2) (фотоны, π -мезоны, частицы, состоящие из бозонов или чётного числа фермионов).

Для электронов (и других фермионов) нет необходимости проводить антисимметризацию Ψ -функций всех электронов. Волновая функция должна быть антисимметризована для всех электронов с заметно перекрывающимися Ψ -функциями

Слой – совокупность электронов атома с одинаковым значением n .

n	1	2	3	4	5	6
слой	K	L	M	N	O	P

Оболочка – совокупность электронов атома с одинаковыми значениями n и l .

Заполненный слой (оболочка) – полностью заполненный слой (оболочка)

Эквивалентные электроны – электроны, принадлежащие одной оболочке (n, l)

слои	K		L			M								
оболочка(n, l)	1s	2s	2p			3s	3p			3d				
m_l	0	0	+1	0	-1	0	+1	0	-1	+2	+1	0	-1	-2
m_s	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$

Обознач.

$m_s = +\frac{1}{2} = \uparrow$

$m_s = -\frac{1}{2} = \downarrow$

(Обознач.)
 $m_s = +\frac{1}{2} = \uparrow$
 $m_s = -\frac{1}{2} = \downarrow$

Полностью заполненные слои и оболочки имеют $L=0, S=0, J=0$

Электронная конфигурация – распределение электронов по состояниям (например: $1s^2 2s^2 2p^6 3s$)

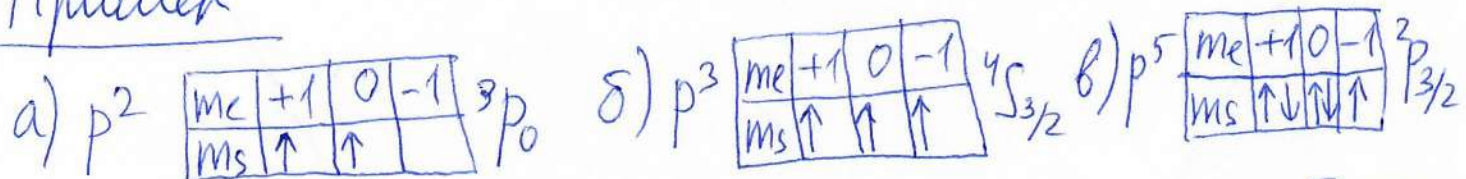
Каждый период периодической системы начинается с заполнения s -оболочки и заканчивается заполнением p -оболочки (периоды со 2го по 6й)

Правила Хунда (относительно и атомные эквиваленты) их электронов

① Минимальной энергией обладает состояние с наибольшим возможным значением спина S и с наибольшим возможным при данном S знач. L

② $J = \begin{cases} |L-S|, & \text{если заполнено не более половины оболочек} \\ L+S, & \text{в остальных случаях} \end{cases}$

Пример



Замечание. 1) В тяжелых атомах могут быть две незаполненные оболочки. В этом случае по правилу Хунда определяющие L, S, J для каждой оболочки, а затем определяющие квантовые числа всего атома.

2) Основное состояние атомов с почти заполненными оболочками проще находить, исходя из состояния с полностью заполненной оболочкой. Числа L и S равны квантовым числам недостающих электронов.

Эффект Зеемана

Эффект Зеемана — расщепление спектральных линий в магнитном поле

Гамильтониан атома в магнитном поле \vec{B} :

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{U}_K + \hat{U}_{SL} + \hat{U}_{SB} + \hat{U}_{LB} \quad (1)$$

где: \hat{K} — оператор кинетической энергии электронов

\hat{U}_K — оператор кулоновской энергии взаимодействия электронов с ядром и друг с другом.

\hat{U}_{SL} — оператор спин-орбитального взаимодействия (определяет тонкую структуру)

\hat{U}_{SB} — оператор взаимодействия спинового магнитного момента с полем \vec{B}

\hat{U}_{LB} - оператор взаимодействия орбитального магнитного момента с полем \vec{B} .

(В (1) отброшены члены $\sim B^2$, определяющие диа-
магнитную восприимчивость)

Сложный эффект Зеемана возникает в сла-
бых магнитных полях (в (1) $\hat{U}_{SL} \gg \hat{U}_{SB}, \hat{U}_{LB}$).

В этом случае расщепление атомных уровней
мало по сравнению с расщеплением между мульти-
плетной структурой.

Каждая из линий расщепляется на много компонент
(больше трёх).

Пусть ось $z \parallel \vec{B}$. Энергия атома в магнитном поле:

$$\boxed{E = E_0 + g \mu_B m_J B} \quad m_J = J, J-1, \dots, -J \quad (2)$$

где m_J - магнитное квантовое число

1й способ

$$E = E_0 - \mu_z B = E_0 + g \mu_B m_J B$$

$$\boxed{\mu_z = -g \mu_B m_J}$$

2й способ

$$E = E_0 - \vec{\mu}_J \vec{B} = E_0 + g \mu_B m_J B$$

$$\boxed{[\vec{\mu}_J = -g \mu_B \vec{J}] \Rightarrow -\vec{\mu}_J \vec{B} = g \mu_B m_J B}$$

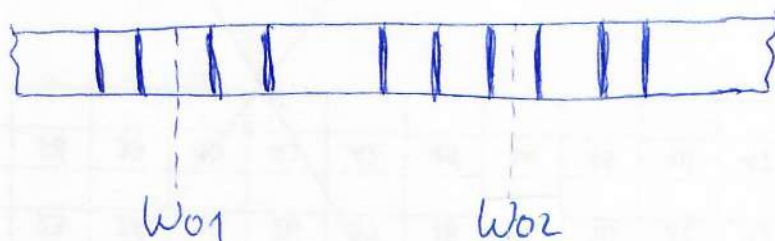
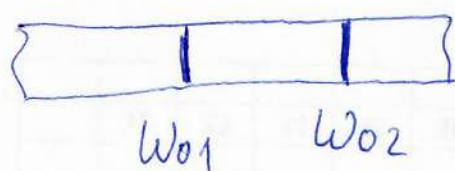
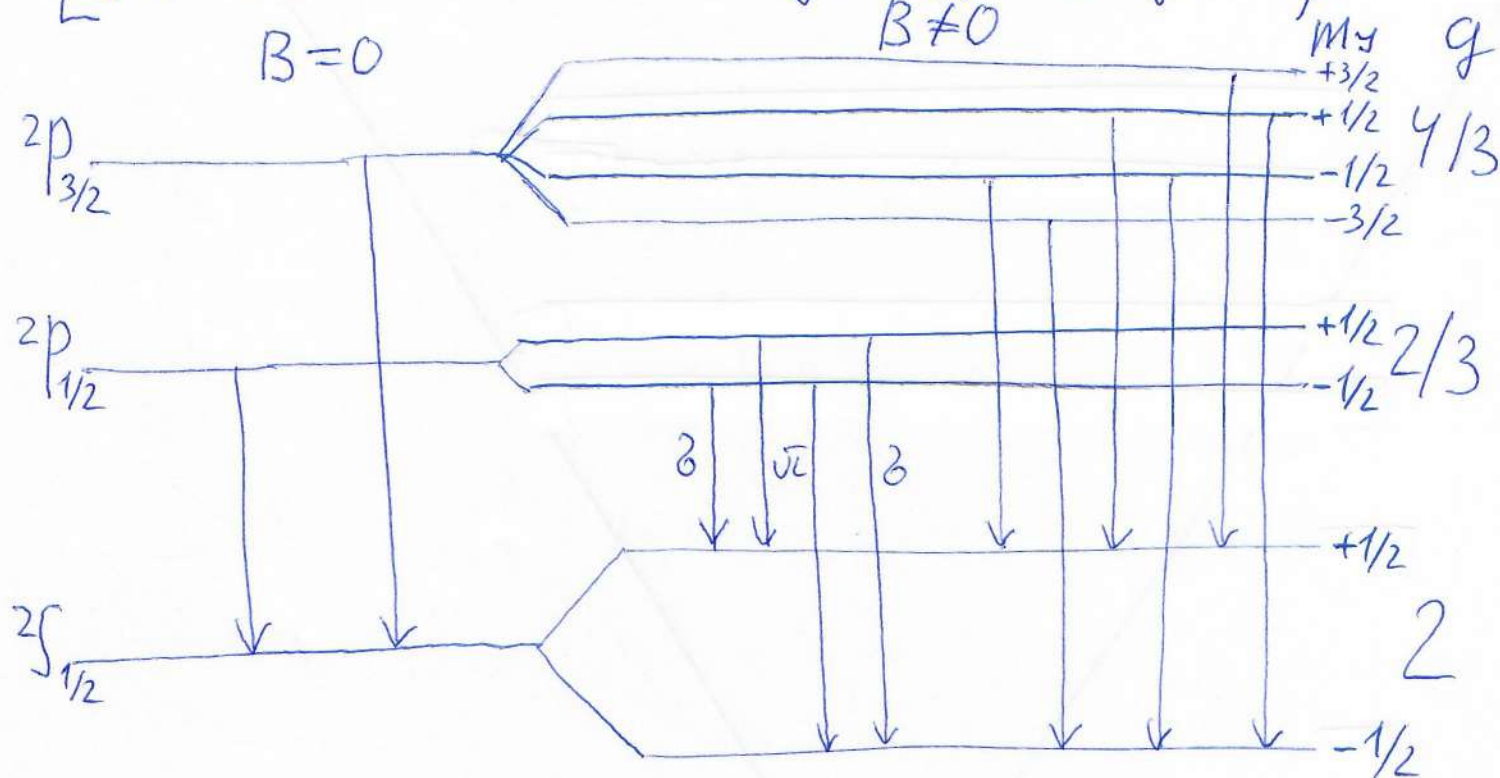
Частоты зеемановских компонент:

$$\boxed{\omega = \omega_0 + \frac{\mu_B B}{\hbar} (g_2 m_{J_2} - g_1 m_{J_1})} \quad (3)$$

где $\omega_0 = \frac{E_{02} - E_{01}}{\hbar}$ - частота при $B=0$

$$[\hbar\omega = E_2 - E_1 \stackrel{(2)}{=} E_{02} - E_{01} + \mu_B B (g_2 m_{J2} - g_1 m_{J1})]$$

$B=0$ $B \neq 0$



Расщепление дублета Na.

Замечание.

- 1) Возможны только циркулярные переходы, при которых: $\Delta m_J = 0; \pm 1$
- 2) π -компоненты соответствуют $\Delta m_J = 0$
 σ -компоненты соответствуют $\Delta m_J = \pm 1$.

Прямой эффект Зеемана возникает в сильных магнитных полях ($(1) \hat{U}_{SL} \ll \hat{U}_{SB}, \hat{U}_{LB}$, т.е. в сильном поле связь векторов \vec{L} и \vec{S} разрушается").

В этом случае расщепление атомных уровней верно по сравнению с расщеплением между линиями мощной структуры. Каждая линия расщепляется на три подкомпоненты. Пусть ось $z \parallel \vec{B}$. Энергия атома в магнитном поле:

$$E = E_0 + \mu_B B (m_L + 2m_S) \quad (4)$$

По аналогии с (2):

$$E = E_0 + \underbrace{g_L}_{1} \mu_B m_L B + \underbrace{g_S}_{2} \mu_B m_S B = E_0 + \mu_B B (m_L + 2m_S)$$

Частоты зеемановских компонент:

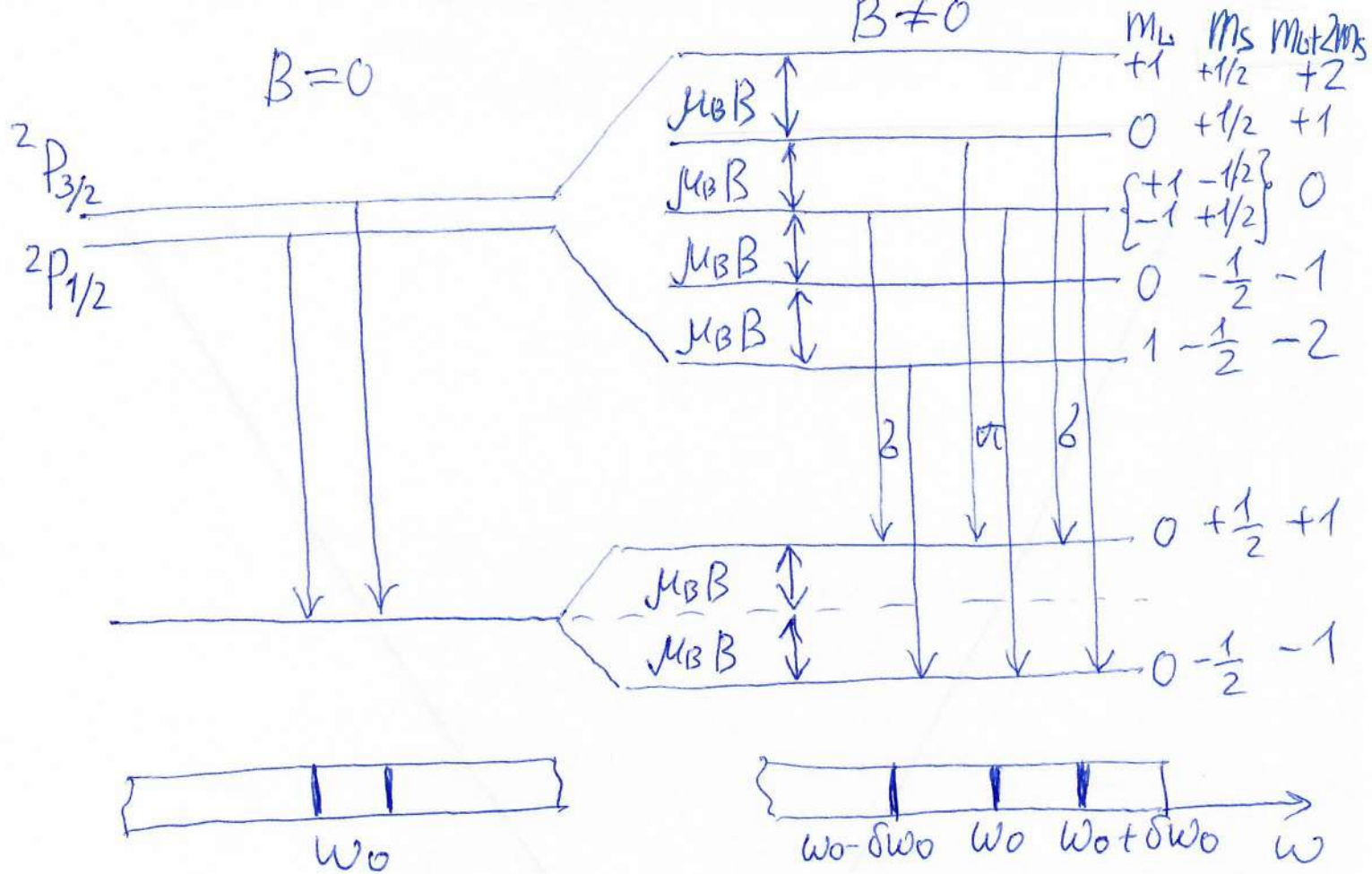
$$\omega = \omega_0 + \frac{\mu_B B}{\hbar} (m_{L2} - m_{L1}) \quad (5)$$

где $\omega_0 = \frac{E_{02} - E_{01}}{\hbar}$ — частота при $B=0$

$$\text{СГС: } \delta\omega_0 = \frac{\mu_B B}{\hbar} = \frac{eB}{2mc} \quad \text{СИ: } \delta\omega_0 = \frac{\mu_B B}{\hbar} = \frac{eB}{2m}$$

$\delta\omega_0$ — ларморовская частота

$$\hbar\omega = E_2 - E_1 \stackrel{(4)}{=} E_{02} - E_{01} + \mu_B B [m_{L2} - m_{L1} + 2(m_{S2} - m_{S1})]$$



Расщепление дублета Na.

Замечание.

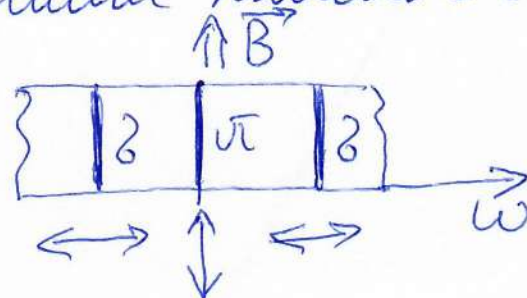
1) Возможны только циркулярные переходы, при которых: $\Delta M_S = 0, \Delta M_L = 0, \pm 1$.

2) Две переходов между сплитированными термами ($S=0, J=L, m_J=m_L, g=1$) расщепление линий на три компоненты происходит при любом магнитном поле. (Иногда именно этот эффект называют простым эффектом Зеемана. То, что мы называем простым эффектом Зеемана не две переходов между сплитированными термами иногда называют эффектом Памена-Баха.)

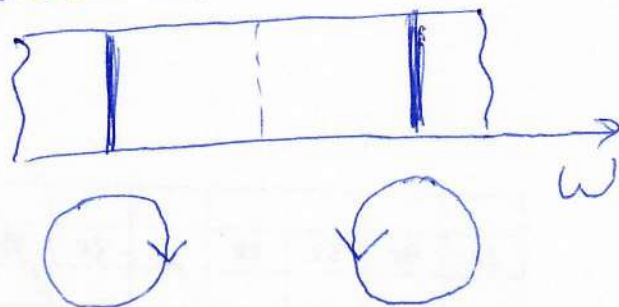
Померизацне земањованих компоненти

Рассмотрим простой эффект Зеемана.

- 1) При наблюдении перпендикулярно магнитному полю, видим все три компонента. Они померизованы линейно.



- 2) При наблюдении вдоль магнитного поля, π-компонента отсутствует, а δ-компоненты имеют кривую померизацию в противоположных направлениях



0-7-1 | $n=3$
j-?
m_j-?

$$n=3 \Rightarrow l_{\max} = n-1 = 2$$

$$j = l \pm s = l \pm \frac{1}{2} \text{ (положительное число)}$$

$$l=0: j = \frac{1}{2}; m_j = \pm \frac{1}{2}$$

$$l=1: j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; m_j = \pm \frac{1}{2}; \pm \frac{3}{2}$$

$$l=2: j = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}; m_j = \pm \frac{1}{2}; \pm \frac{3}{2}; \pm \frac{5}{2}$$

$$\textcircled{0-7-2} \quad 2p$$

$$j-?$$

$$2p \Rightarrow n=2; \ell=1$$

$$j = \ell \pm S = \ell \pm \frac{1}{2} \quad (\text{положительное число})$$

$$j = \frac{1}{2}; \frac{3}{2}$$

$$\textcircled{6.20} \quad 3^2P \rightarrow 3^2S$$

$$\lambda_1 = 5896 \text{ \AA}$$

$$\lambda_2 = 5890 \text{ \AA}$$

$$\Delta E-?$$

$$B-?$$

$$\text{Энергия фотона: } E = \frac{2\pi c h}{\lambda}$$

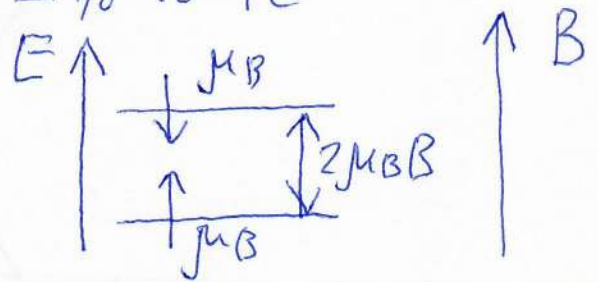
$$\Delta E = 2\pi c h \left(\frac{1}{\lambda_2} - \frac{1}{\lambda_1} \right) =$$

$$= \frac{6,63 \cdot 10^{-27} \cdot 3 \cdot 10^{10}}{1,6 \cdot 10^{-12}} \left(\frac{1}{5890 \cdot 10^{-8}} - \frac{1}{5896 \cdot 10^{-8}} \right) \approx$$

$$\approx 2,1 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}$$

$$\Delta E = 2\mu_B B$$

$$B = \frac{\Delta E}{2\mu_B} = \frac{2,1 \cdot 10^{-3} \cdot 1,6 \cdot 10^{-12}}{2 \cdot 0,927 \cdot 10^{-20}} \approx 1,8 \cdot 10^5 \text{ Гс}$$



$\textcircled{6.48}$ Потенциальная энергия взаимодействия диполей:

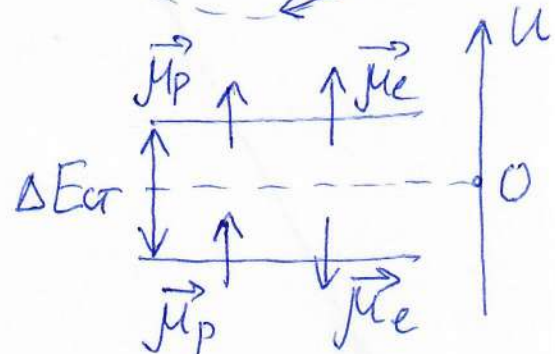
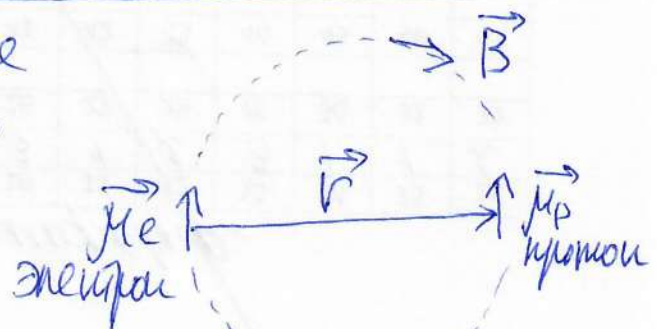
$$U = -\vec{\mu}_p \vec{B} = \frac{\vec{\mu}_p \vec{\mu}_e}{r^3}$$

$$\vec{B} = \frac{3(\vec{\mu}_e \vec{r})}{r^5} \vec{r} - \frac{\vec{\mu}_e}{r^3} = -\frac{\vec{\mu}_e}{r^3}$$

поле диполя $\vec{\mu}_e$

Сверхтонкое расщепление основного состояния атома водорода:

$$\Delta E_{\text{с.т.}} = 2U \stackrel{(1)}{=} 2 \frac{\mu_p \mu_e}{r_1^3} = \frac{2 \cdot 2,79 \mu_B \mu_e}{r_1^3} \quad (2)$$



где μ_e и μ_p — магнитные моменты
моментов на выделенное направление

$$\left[\mu_e = \frac{g_e}{2} \mu_B \frac{S_e}{1/2} = \mu_B \right.$$

$$\left[\mu_p = \frac{g_p}{5,58} \mu_B \frac{S_p}{1/2} = 2,79 \mu_B \right.$$

$$\Delta E_{\text{ст}} = \hbar \omega = \hbar \frac{2\pi \hbar c}{\lambda}; \quad \lambda = \frac{2\pi \hbar c}{\Delta E_{\text{ст}}} \stackrel{(2)}{=} \frac{2\pi \hbar c r_1^3}{2 \cdot 2,79 \cdot \mu_B \mu_e} =$$

$$= \frac{\pi \hbar c r_1^3}{2,79 \cdot \mu_B \mu_e} = \frac{3,14 \cdot 1,05 \cdot 10^{-27} \cdot 3 \cdot 10^{10} \cdot (0,53 \cdot 10^{-8})^3}{2,79 \cdot 0,927 \cdot 10^{-20} \cdot 5,05 \cdot 10^{-24}} \approx 113 \text{ нм}$$

(экспериментальное значение: $\lambda = 21 \text{ нм}$)

где $\mu_e = \frac{e \hbar}{2 m_p c} = 5,05 \cdot 10^{-24} \frac{\text{Эм}}{\text{Гс}}$ — ядерный магнетон
Бора

Магнитное поле электрона по условию задано:

$$\vec{B} = \vec{H} + 4\pi \vec{M} = -\frac{4\pi}{3} \vec{M} + 4\pi \vec{M} = \frac{8\pi}{3} \vec{M} = \frac{8\pi}{3} \frac{\mu_e}{\frac{4}{3}\pi r^3} =$$

$$= \frac{2\mu_e}{r^3} - \text{поле в 2 раза больше} \Rightarrow \Delta E_{\text{ст}} \text{ в 2}$$

раза больше, а λ в 2 раза меньше ($\lambda \approx 56 \text{ нм}$)

$$(6.75) \quad E = -3,4 \text{ эВ} \quad E = -\frac{R_1}{n^2}; \quad n = \sqrt{-\frac{R_1}{E}} = \sqrt{\frac{13,6}{3,4}} = 2$$

$N = ?$

Замечание.

$$n = n_r + l + 1$$

n — главное квантовое число

n_r — радиальное квантовое число (число нулей радиальной части волновой функции на интервале $0 < r < \infty$)

$$l = n - n_r - 1 = 2 - 2 = 0$$

$$S = \frac{1}{2}; \quad J = S = \frac{1}{2}$$

В сильном магнитном поле (простой эффект Зеемана):

$$E_B = E + \mu_B B (m_l + 2m_s)$$

$m_l + 2m_s = \pm 1$, Число уровней: $N_1 = 2$

В слабом магнитном поле (сложный эффект Зеемана):

$$E_B = E + 2\mu_B B m_j$$

$m_j = \pm \frac{1}{2}$, Число уровней: $N_2 = 2$

(Уровень расщепляется на 2 подуровня)
при любом поле B

(6.77) Fe^{10+}

$$^1D_2 \rightarrow ^3P_2 (\lambda_1 = 2649 \text{ \AA})$$

$$^1D_2 \rightarrow ^3P_1 (\lambda_2 = 3987 \text{ \AA})$$

$$E_{SL} = A \langle \vec{L} \vec{S} \rangle \quad (A < 0)$$

$$\lambda - ? \quad (^3P_0 \rightarrow ^3P_1)$$

$$\langle \vec{J}^2 \rangle = \langle (\vec{L} + \vec{S})^2 \rangle = 2 \langle \vec{L} \vec{S} \rangle + \langle \vec{L}^2 \rangle + \langle \vec{S}^2 \rangle$$

$$\langle \vec{L} \vec{S} \rangle = \frac{1}{2} [\langle \vec{J}^2 \rangle - \langle \vec{L}^2 \rangle - \langle \vec{S}^2 \rangle] = \frac{1}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] \quad (1)$$

Энергия спин-орбитального взаимодействия:

$$E_{SL} = A \langle \vec{L} \vec{S} \rangle \stackrel{(1)}{=} \frac{A}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] \quad (2)$$

Энергии уровней тонкой структуры $^3P_2, ^3P_1, ^3P_0$ отличающиеся энергией E_{SL} :

$$\begin{aligned} E(^3P_2) - E(^3P_1) &= [E(^3P) + E_{SL}(J=2)] - [E(^3P) + E_{SL}(J=1)] = \\ &= E_{SL}(J=2) - E_{SL}(J=1) \stackrel{(2)}{=} A \frac{2 \cdot 3 - 1 \cdot 2 - 1 \cdot 2}{2} - A \frac{1 \cdot 2 - 1 \cdot 2 - 1 \cdot 2}{2} = \\ &= \frac{A}{2} (2+2) = 2A < 0 \quad (3) \end{aligned}$$

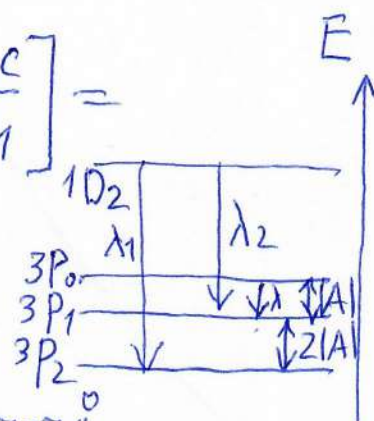
$$\begin{aligned} E(^3P_1) - E(^3P_0) &= [E(^3P) + E_{SL}(J=1)] - [E(^3P) + E_{SL}(J=0)] = \\ &= E_{SL}(J=1) - E_{SL}(J=0) \stackrel{(2)}{=} A \frac{1 \cdot 2 - 1 \cdot 2 - 1 \cdot 2}{2} - A \frac{0 - 1 \cdot 2 - 1 \cdot 2}{2} = \\ &= \frac{A}{2} (-2+4) = A < 0 \quad (4) \end{aligned}$$

С группой атомов:

$$\begin{aligned} E(^3P_1) - E(^3P_2) &= [E(^1D_2) - \frac{hc}{\lambda_2}] - [E(^1D_2) - \frac{hc}{\lambda_1}] = \\ &= hc \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right) \quad (5) \end{aligned}$$

$$\frac{hc}{\lambda} = E(^3P_0) - E(^3P_1) \stackrel{(3)(4)}{=} \frac{E(^3P_1) - E(^3P_2)}{2} \stackrel{(5)}{=}$$

$$\stackrel{(5)}{=} \frac{hc}{2} \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right) \Rightarrow \lambda = \frac{2\lambda_1\lambda_2}{\lambda_2 - \lambda_1} = \frac{2 \cdot 2649 \cdot 3987}{3987 - 2649} = 15787 \text{ \AA}$$



$$\textcircled{6.80} (\mu_z)_{\max} = 2,4 \mu_B \quad \left| \begin{array}{l} \text{По условию: } 2S+1=5 \Rightarrow \\ \Rightarrow S=2 \quad (1) \\ \hline L=? \end{array} \right.$$

Число расщепившихся
компонент в экстерннессе интерна-
Гермха: $2J+1=9 \Rightarrow J=4 \quad (2)$
↑
по условию

Максимальный момент атома
(максимальное квантовое):

$$(\mu_z)_{\max} = g \mu_B J \stackrel{(2)}{=} 4g \mu_B \Rightarrow g = \frac{2,4}{4} = 0,6 = \frac{3}{5} \quad (3)$$

$$\underset{2,4 \mu_B}{\mu_z} \quad g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (4)$$

$$(1), (2), (3) \rightarrow (4): \frac{3}{5} = \frac{3}{2} + \frac{2 \cdot 3 - L(L+1)}{2 \cdot 4 \cdot 5}$$

$$24 = 60 + 6 - L(L+1)$$

$$L^2 + L - 42 = 0$$

$$L = \frac{-1 + \sqrt{169}}{2} = \frac{-1 + 13}{2} = 6$$

(74) Электронные конфигурации $1s^2 2s^2 2p^2$

1) Все возможные одноэлектронные состояния $|m_l, m_s\rangle$ (всего $q = 2(2l+1) = 2(2 \cdot 1 + 1) = 6$):

- 1) $|1, \frac{1}{2}\rangle$, 4) $|1, -\frac{1}{2}\rangle$,
 2) $|0, \frac{1}{2}\rangle$, 5) $|0, -\frac{1}{2}\rangle$,
 3) $|-1, \frac{1}{2}\rangle$, 6) $|-1, -\frac{1}{2}\rangle$.

2) Все возможные двухэлектронные состояния

$$|M_L, M_S\rangle, \text{ где } M_L = m_{l1} + m_{l2}, M_S = m_{s1} + m_{s2}$$

$$(\text{всего } C_q^2 = C_6^2 = \frac{6!}{2!(6-2)!} = \frac{5 \cdot 6}{1 \cdot 2} = 15)$$

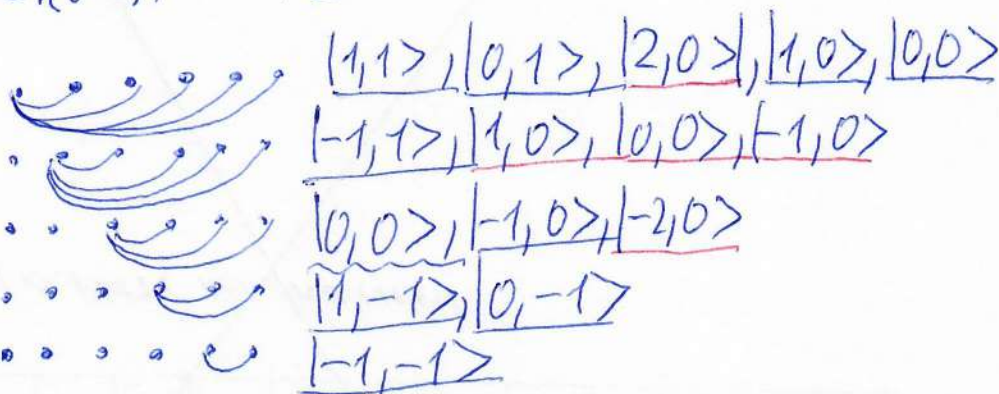
12, 13, 14, 15, 16

23, 24, 25, 26

34, 35, 36

45, 46

56



3) Выбираем состояние с максимальным M_L ,

а в случае нескольких таких состояний выбираем из них состояние с максимальным M_S : $|2, 0\rangle \Rightarrow$ есть терм $L=2, S=0$ (1D)

4) Из полного списка состояний (п.2) подчёркиваем $(2L+1)(2S+1) = 5$ состояний, отвечающих этому терму

5) Повторим п. 3), 4) пока не будут выбраны все состояния

— $L=2, S=0$ (1D)

— $L=1, S=1$ (3P)

~ $L=0, S=0$ (1S)

По правилу Хунда основное состояние соответствует терму 3P