

Физика атома, атомного ядра и элементарных частиц

17(1). Полный момент импульса
электрона в атоме. Символические
обозначения термов. Правила отбора
для оптических переходов.

Операции с векторами \mathbf{L} и \mathbf{S} можно производить с помощью следующего полуклассического метода. Вектора складываются по обычным правилам параллелограмма:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad (17.1)$$

в результате получается вектор \mathbf{J} - вектор полного момента импульса. В это чисто классическое правило вносятся следующие поправки, характерные для квантовой механики. Во-первых, углы между векторами \mathbf{L} и \mathbf{S} не могут быть произвольными. Вектор \mathbf{L} может располагаться относительно вектора \mathbf{J} только под такими углами, чтобы его проекция на направление \mathbf{J} была равна $m\hbar$, где $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$. Аналогичное требование предъявляется и к ориентации вектора \mathbf{S} : его проекция на направление \mathbf{J} равна $m_s\hbar$, где $m_s = \pm 1/2$. Таким образом, угол между \mathbf{L} и \mathbf{S} может принимать ряд дискретных значений.

Во-вторых, полный момент \mathbf{J} , как всякий момент импульса в квантовой механике имеет свое квантовое число j , такое, что

$$J = \hbar \sqrt{j(j+1)} \quad (17.2)$$

Число j называется **внутренним квантовым числом**, оно может принимать значения:

$$j = l + s, l + s - 1, l + s - 2, \dots, |l - s| \quad (17.3)$$

Формула (17.3) записана в общем виде для любой величины вектора \mathbf{S} . Если рассматривается всего один электрон, то $s = 1/2$, и тогда j может принимать всего два значения:

$$j = l + 1/2 \quad \text{и} \quad j = l - 1/2 \quad (17.4)$$

Проекция вектора \mathbf{J} на какое либо направление Z (ось квантования, направление внешнего магнитного или электрического поля и т.д.) в соответствии с законами квантовой механики равна:

$$J_Z = m_j \hbar, \quad (17.5)$$

где $m_j = j, j-1, j-2, \dots, -j$ (17.6)

т.е. m_j может принимать $(2j + 1)$ значений. Число m_j называется **магнитным внутренним квантовым числом**. Если j - полуцелое число, то в этом случае m_j не принимает значение 0.

Эти правила сложения векторов L и S составляют **векторную модель атома**, имеющую большое практическое значение: модель проста и наглядна, а ее результаты совпадают с экспериментом и с результатами точного квантовомеханического решения.

Различные состояния атома (термы) принято обозначать специальными символами, по которым сразу можно указать все квантовые числа. Общий вид такого обозначения:

$${}^{\kappa} L_J \quad (17.7)$$

где квантовое число L обозначает орбитальный момент всего атома (так же, как и для отдельного электрона):

L =	0	1	2	3	4	...
Символ	S	P	D	F	G	...

Справа внизу записывается квантовое число полного момента атома, слева вверху – кратность (мультиплетность) терма:

$$\kappa = 2S + 1 \quad (17.8)$$

где S – спиновое квантовое число всего атома.

Т.к. терм - это характеристика всего атома, то используются прописные буквы вместо строчных (которые применяются для отдельного электрона). Примеры:

Запись ${}^2P_{3/2}$ (читается "дублет P три вторых") означает, что $L = 1$, $S = 1/2$, $J = 3/2$.

Запись 1S_0 (читается "синглет S ноль") означает, что $L = 0$, $S = 0$, $J = 0$.

Запись 3D_2 (читается "триплет D два") означает, что $L = 2$, $S = 1$, $J = 2$.

Правила отбора для оптических переходов

Согласно комбинационному принципу, волновое число любой спектральной линии (в испускании и поглощении) может быть представлена как разность двух термов

$$k = \frac{1}{\lambda} = T_m - T_n \quad (17.9)$$

Но обратное утверждение не всегда справедливо: не всякая комбинация термов дает частоту, соответствующую реально наблюдаемой спектральной линии. Существуют определенные правила отбора, указывающие, какие комбинации термов возможны, какие нет (точнее маловероятны или даже имеют нулевую вероятность).

Эти правила связаны с законами сохранения момента импульса и четности в квантовых переходах. В частности установлено, что в атоме наиболее вероятны переходы между состояниями, при которых квантовые числа l и m меняются на величину:

$$\Delta l = \pm 1 ; \quad \Delta m = 0 ; \quad \pm 1 \quad (17.10)$$

причем правило отбора для магнитного квантового числа m надо учитывать только в том случае, если атом находится в магнитном поле. На главные квантовые числа n_1 и n_2 никаких ограничений не накладывается, т.е. величина Δn может быть любой.

Если условие (17.10) соблюдается, то такие переходы называются разрешенными. Другие переходы маловероятны, и их называют запрещенными. Другими словами, разрешены переходы между соседними по l уровнями, т.е. между s - и p -состояниями, между p - и d -состояниями, между d - и f -состояниями и т.д.

Интенсивность спектральной линии определяется вероятностью перехода электрона из одного состояния в другое. В теории Бора это можно было представить наглядно в виде пространственного перемещения электрона с одной орбиты на другую. В квантовой теории никаких орбит нет, а переход связан с представлением об изменении волновой функции.

Вероятность перехода определяется так называемым матричным элементом: интегралом вида

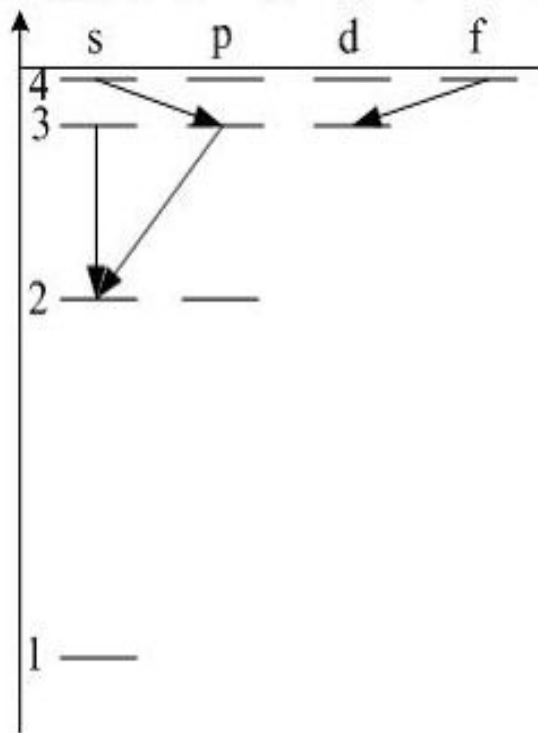
$$D_{mn} = ex_{mn} = \int \psi_m^* ex \psi_n dx \quad (17.11)$$

который представляет собой дипольный момент ex , усредненный между состояниями Ψ_m и Ψ_n . Вычисления этого элемента и приводят к сформулированным выше правилам отбора. Отметим еще раз, что правила отбора имеют вероятностный характер: "запрещенные" спектральные линии иногда можно наблюдать, но они имеют малую интенсивность.

Интернет-экзамен

Задание N 25.

Закон сохранения момента импульса накладывает ограничения на возможные переходы электрона в атоме с одного уровня на другой (правило отбора). В энергетическом спектре атома водорода (рис.) запрещенным переходом является...



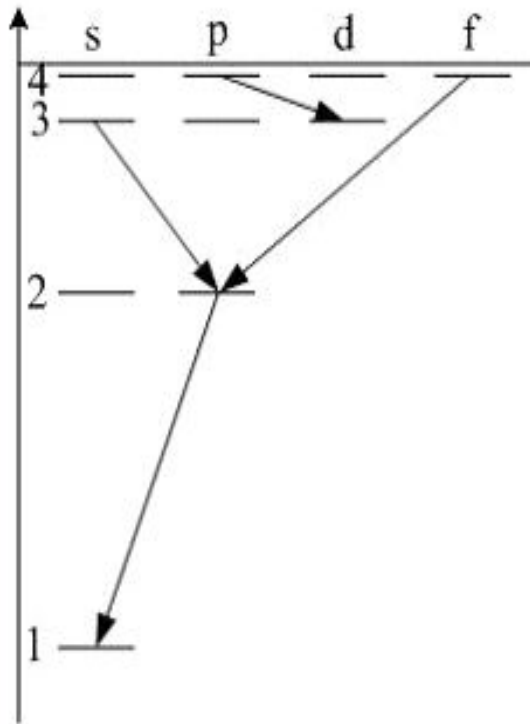
Варианты ответа:

- $3s - 2s$
- $4f - 3d$
- $4s - 3p$
- $3p - 2s$

Интернет-экзамен

Задание N 11

При переходах электрона в атоме с одного уровня на другой закон сохранения момента импульса накладывает определенные ограничения (правило отбора). В энергетическом спектре атома водорода (рис.) запрещенным переходом является...



Варианты ответов

- 4p – 3d
- 2p – 1s
- 3s – 2p
- 4f – 2p