

# Атомные термы

## Орбитальная модель многоэлектронного атома

$$e_1 \leftrightarrow \psi_1 \quad \{ n, \square, m_{\square}, m_s \}_1$$

$$e_2 \leftrightarrow \psi_2 \quad \{ n, \square, m_{\square}, m_s \}_2$$

.....

.....

$$e_n \leftrightarrow \psi_n \quad \{ n, \square, m_{\square}, m_s \}_n$$



## Оболочечная модель

# Оболочечная модель

Спин-орбитали группируются в оболочки по значениям квантовых чисел

$n, \ell$  – оболочки  $(n, \ell)^v$ , где  $v$  — заселенность (число электронов)

1s-оболочка ( $v_{\text{макс.}} = 2$ )

2s-оболочка ( $v_{\text{макс.}} = 2$ )

2p-оболочка ( $v_{\text{макс.}} = 6$ )

3s-оболочка ( $v_{\text{макс.}} = 2$ )

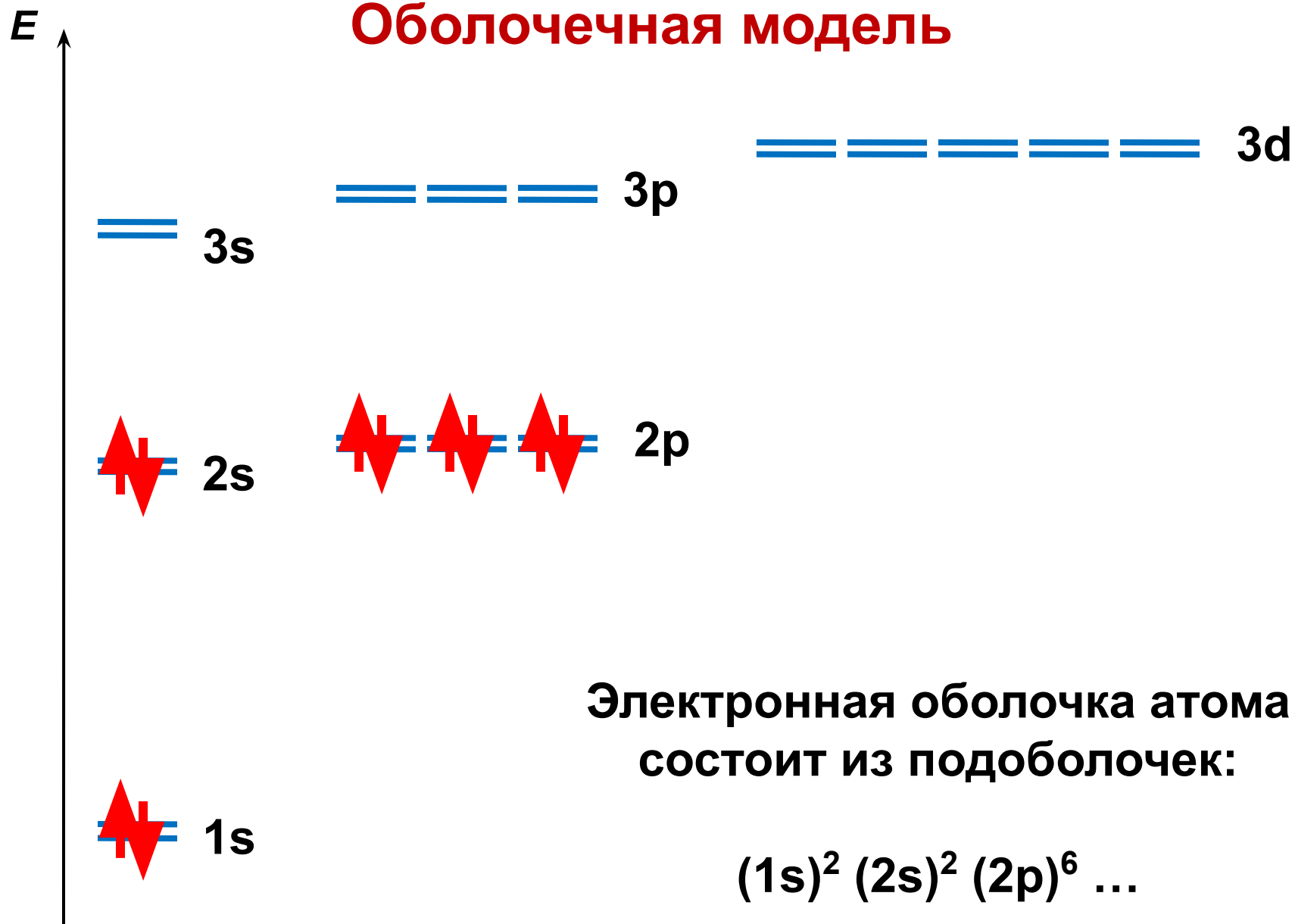
3p-оболочка ( $v_{\text{макс.}} = 6$ )

3d-оболочка ( $v_{\text{макс.}} = 10$ )

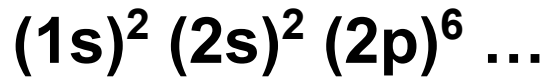
Емкость оболочки

$$v_{\text{макс.}} = 2 \cdot (2\ell + 1)$$

# Оболочечная модель

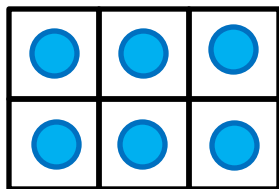


Электронная оболочка атома  
состоит из подоболочек:



# Правила заселения оболочек

$2p^6$  (неон)

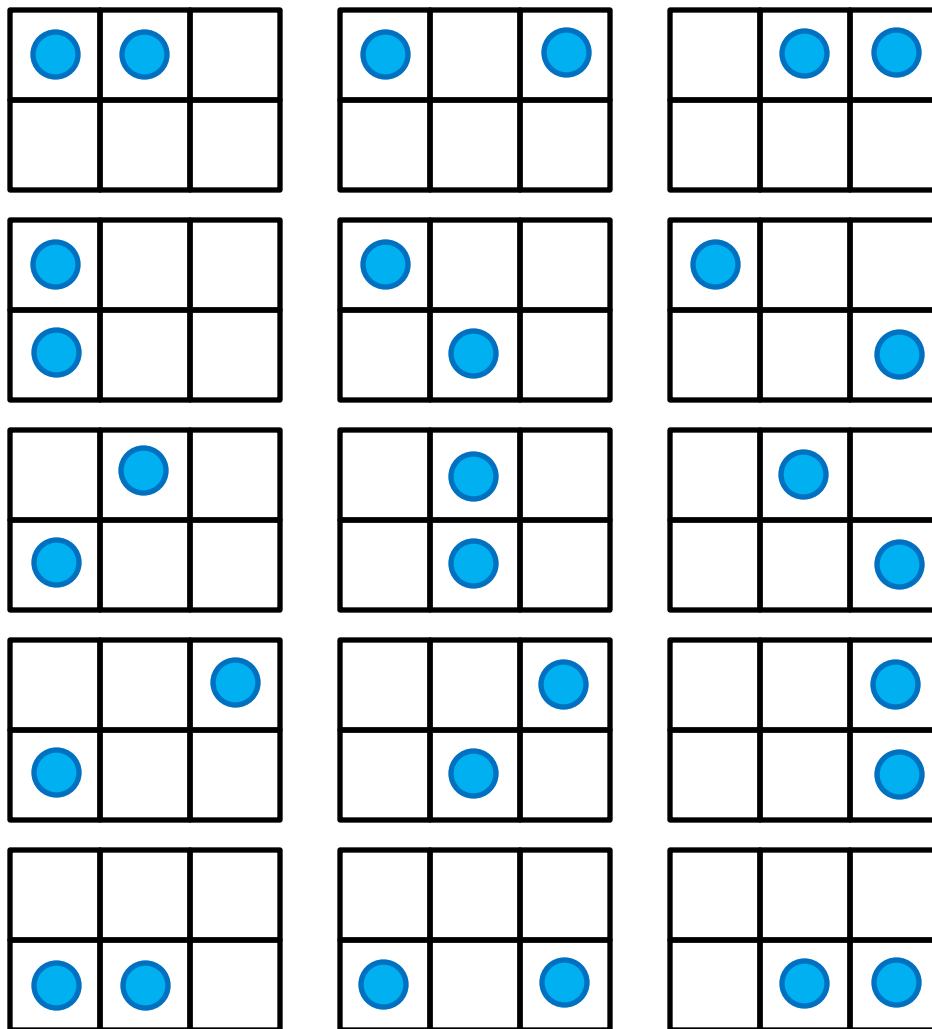


1 конфигурация  
(вариант заселения)

15 конфигураций  
(вариантов заселения)

Какая конфигурация  
реализуется в  
действительности?

$2p^2$  (углерод)



**Правило:** реализуется состояние с минимальной полной энергией

Полная энергия атома зависит от ряда параметров:

- 1) от орбитальных энергий и распределения электронов по атомным орбиталям (электронной конфигурации);
- 2) от кулоновских межэлектронных взаимодействий (межэлектронного отталкивания);
- 3) от магнитного спин-орбитального взаимодействия, обусловленного взаимным влиянием магнитных моментов атома — орбитального и спинового.

---

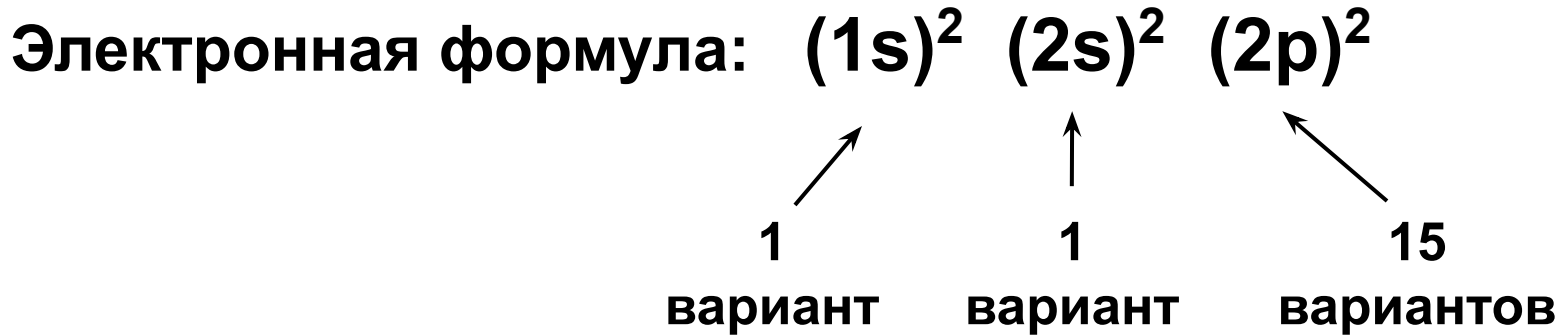
$$E = f ( |L|, |S|, |J| ) \quad \text{или} \quad E = f ( L, S, J )$$

$$E = f( |L|, |S|, |J| ) \quad \text{или} \quad E = f( L, S, J )$$

*Если значения квантовых чисел ( L, S, J )  
заданы, то  $E = \text{const}$*

**Атомный ТЕРМ** — совокупность состояний с заданными значениями квантовых чисел ( L, S, J ) и постоянной энергией  $E = \text{const}$

# Атом углерода



**Задача:** для оболочки  $(2p)^2$  найти значения квантовых чисел  $L$ ,  $S$  и  $J$

**$L, S$  – приближение**

$$L = L_1 + L_2 + \dots$$

$$S = S_1 + S_2 + \dots$$

$$J = L + S$$

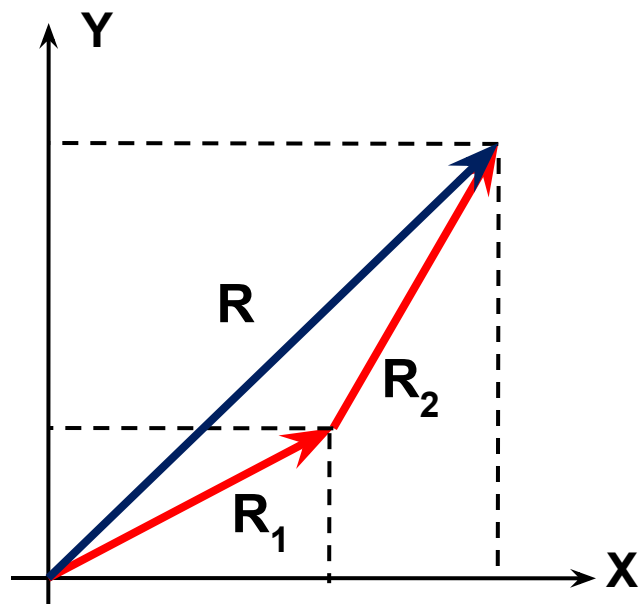
**$j, j$  – приближение**

$$J_1 = L_1 + S_1$$

$$J_2 = L_2 + S_2$$

$$J = J_1 + J_2 + \dots$$

# Сложение векторов

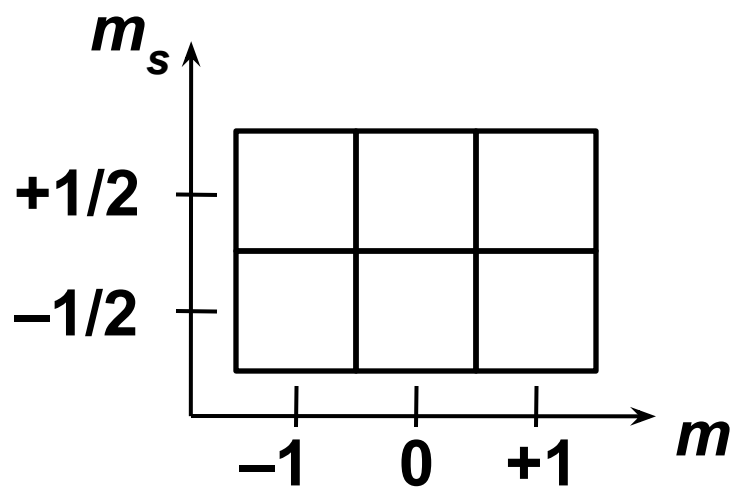


$$R_x = (R_1)_x + (R_2)_x$$

$$R_y = (R_1)_y + (R_2)_y$$

$$M_L = m_{l1} + m_{l2}$$

$$M_S = m_{s1} + m_{s2}$$



$$M_L = \{-2 \quad -1 \quad 0 \quad +1 \quad +2\}$$

$$M_S = \{-1 \quad 0 \quad +1\}$$



Diagram illustrating the possible states of a system with angular momentum quantum number  $M_L$  (horizontal axis) and spin quantum number  $M_S$  (vertical axis).

The horizontal axis ( $M_L$ ) ranges from -2 to +2. The vertical axis ( $M_S$ ) ranges from -1 to +1.

The states are represented by a grid of cells. Each cell contains a 2x3 grid of sub-cells, representing the possible configurations of two particles (e.g., electrons) in three orbitals. Blue dots represent particles. Red 'X' marks indicate states that are not allowed (likely due to the Pauli exclusion principle).

$M_S$	$M_L = -2$	$M_L = -1$	$M_L = 0$	$M_L = +1$	$M_L = +2$
-1					
0					
+1					

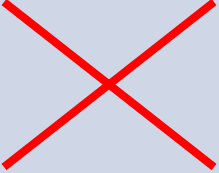
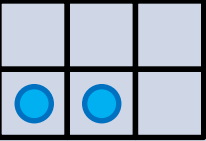
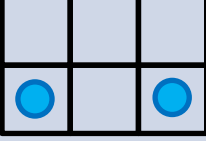
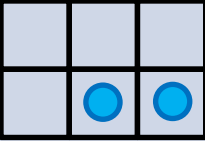
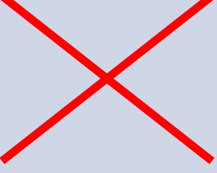
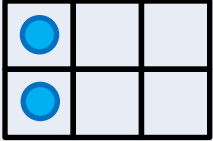
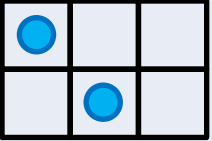
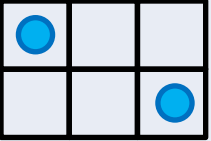
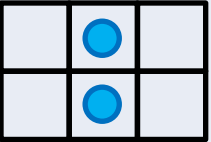
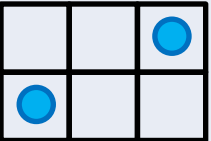
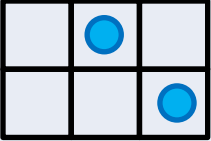
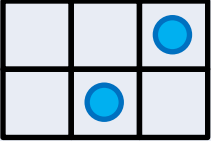

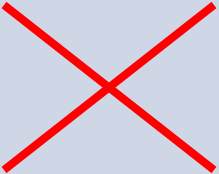
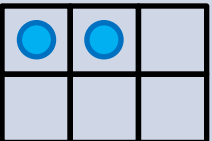
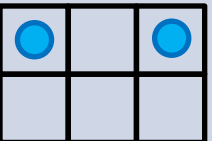
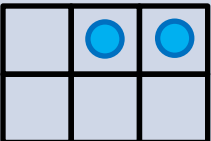

# Правильная таблица

$2L + 1$

	$-L$	$-L + 1$	$\dots$	$+L$
$2S + 1$	$-S$			
	$-S + 1$			
	$\dots$			
	$+S$			

**Каждой клетке соответствует 1 состояние,  
пустых клеток нет**

$M_L$  →

$M_S$		-2	-1	0	+1	+2
-1						
0				  	 	
+1						

$M_S$  ↓

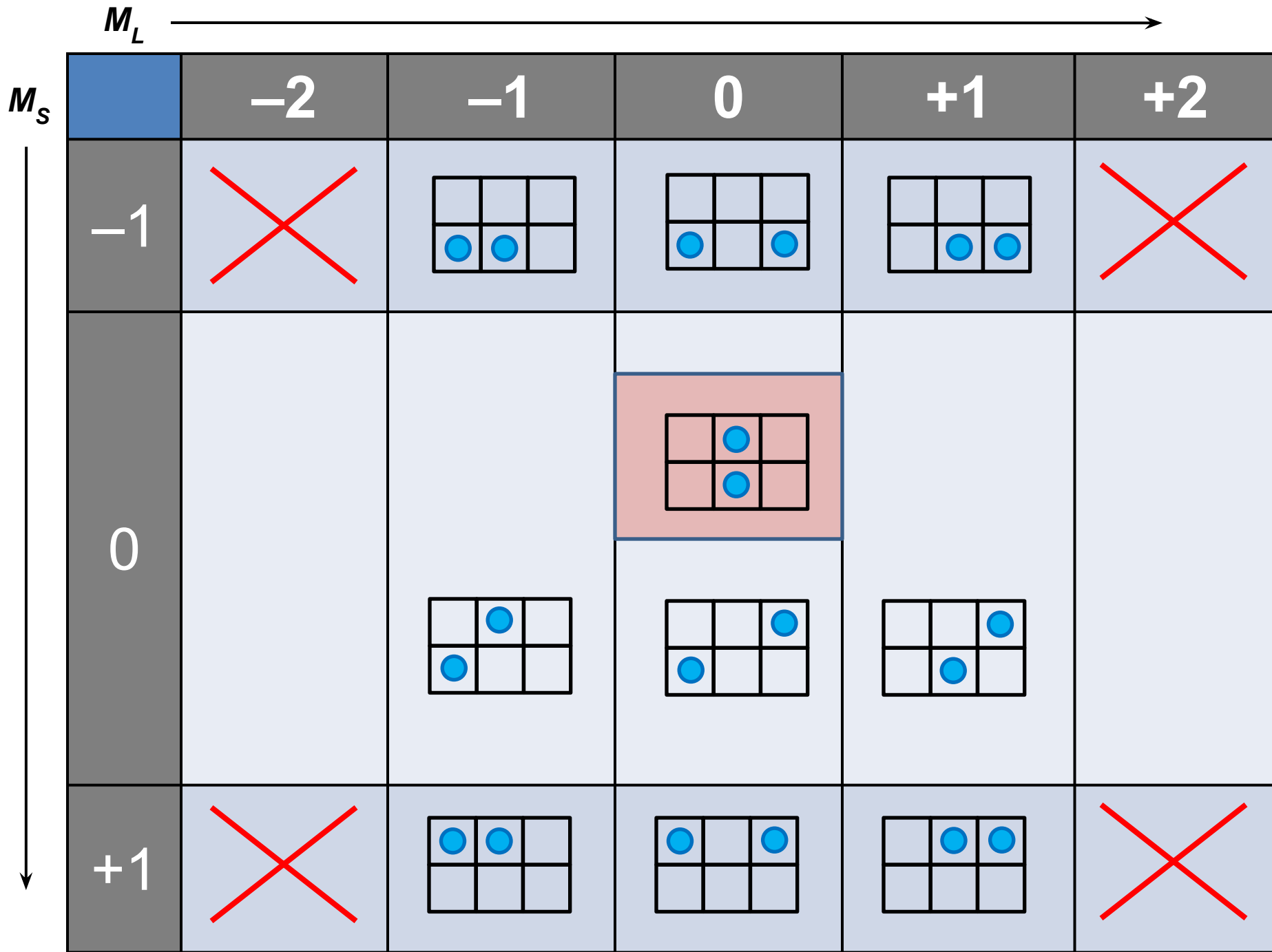


Diagram illustrating the relationship between  $M_L$  (horizontal axis) and  $M_S$  (vertical axis) for a system with three particles, each occupying one of three orbitals.

The horizontal axis ( $M_L$ ) ranges from -2 to +2. The vertical axis ( $M_S$ ) ranges from -1 to +1.

The diagram shows a grid of possible states, with some states crossed out (indicated by a red X) and others containing blue dots representing particles in orbitals.

$M_S$	$M_L = -2$	$M_L = -1$	$M_L = 0$	$M_L = +1$	$M_L = +2$
-1					
0					
+1					

Detailed description of the grid cells:

- Row  $M_S = -1$ :**
  - $M_L = -2$ : Red X.
  - $M_L = -1$ : Three particles in orbitals at  $(1,0)$ ,  $(1,1)$ , and  $(1,2)$ .
  - $M_L = 0$ : Three particles in orbitals at  $(0,0)$ ,  $(0,1)$ , and  $(0,2)$ .
  - $M_L = +1$ : Three particles in orbitals at  $(0,1)$ ,  $(0,2)$ , and  $(0,3)$ .
  - $M_L = +2$ : Red X.
- Row  $M_S = 0$ :**
  - $M_L = -1$ : Three particles in orbitals at  $(1,0)$ ,  $(0,1)$ , and  $(1,2)$ .
  - $M_L = 0$ : Three particles in orbitals at  $(0,0)$ ,  $(0,1)$ , and  $(0,2)$ .
  - $M_L = +1$ : Three particles in orbitals at  $(0,1)$ ,  $(0,2)$ , and  $(0,3)$ .
- Row  $M_S = +1$ :**
  - $M_L = -2$ : Red X.
  - $M_L = -1$ : Three particles in orbitals at  $(0,0)$ ,  $(0,1)$ , and  $(0,2)$ .
  - $M_L = 0$ : Three particles in orbitals at  $(0,0)$ ,  $(0,1)$ , and  $(0,2)$ .
  - $M_L = +1$ : Three particles in orbitals at  $(0,1)$ ,  $(0,2)$ , and  $(0,3)$ .
  - $M_L = +2$ : Red X.

$$L = 2$$

$$S = 0$$

$$2L + 1 = 5$$

$$2S + 1 = 1$$

	-2	-1	0	+1	+2
0					

$$2L + 1 = 1$$

$$2S + 1 = 1$$

	0
0	

$$L = 0$$

$$S = 0$$

$$2L + 1 = 3$$

$$2S + 1 = 3$$

	-1	0	+1
-1			
0			
+1			

$$L = 1$$

$$S = 1$$

# 15 состояний типа 2p

1 состояние

$$\begin{matrix} L = 0 \\ S = 0 \end{matrix}$$

$$E = E_1$$

$^1S$

9 состояний

$$\begin{matrix} L = 1 \\ S = 1 \end{matrix}$$

$$E = E_2$$

$^3P$

5 состояний

$$\begin{matrix} L = 2 \\ S = 0 \end{matrix}$$

$$E = E_3$$

$^1D$

---

## Обозначения термов

Мульти-  
плетность

↘  $2S + 1$

$L$

L	0	1	2	3	4
	S	P	D	F	G

## Как располагаются термы на шкале энергии?

---

**1-е правило Хунда:** минимальную энергию имеет терм с максимальной мультиплетностью (максимальным числом  $S$ )

---

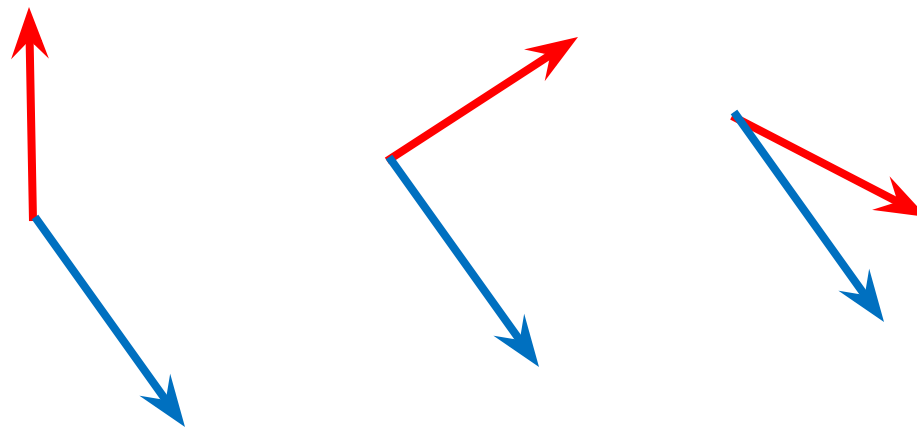
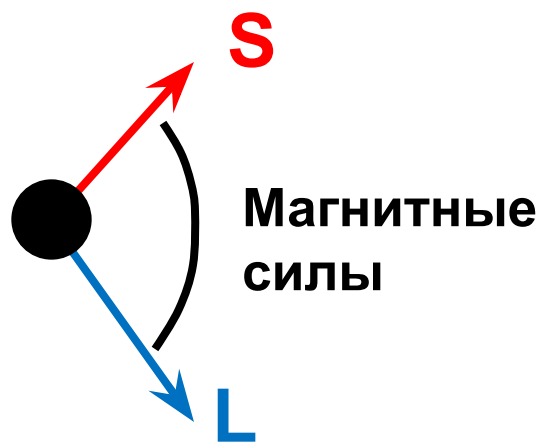
**2-е правило Хунда:** если мультиплетность нескольких термов одинакова, то минимальную энергию из них имеет терм с максимальным числом  $L$

---





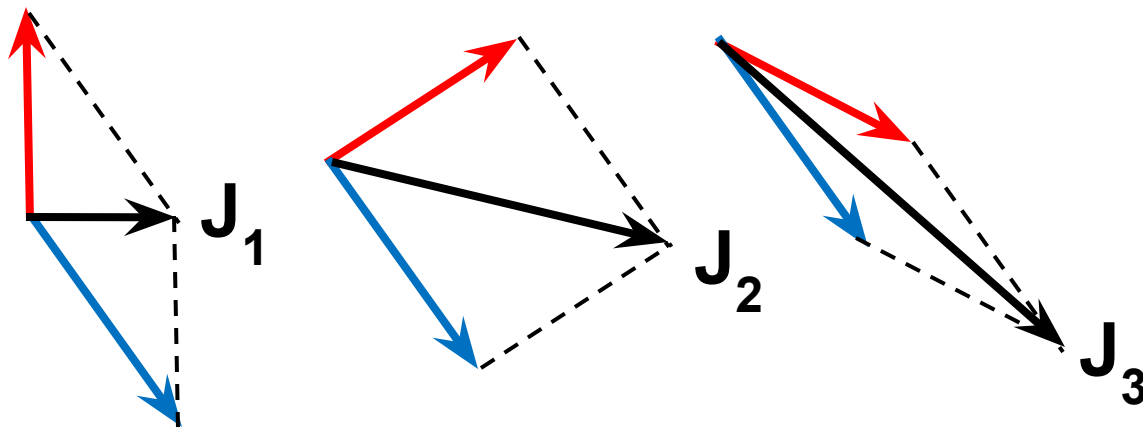
# Спин-орбитальное взаимодействие



Вклад магнитных взаимодействий в энергию атома зависит от взаимной ориентации векторов **L** и **S**

Магнитную энергию можно оценить по величине полного механического момента

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$



**$^1S$**

$$\begin{array}{l} L = 0 \\ S = 0 \end{array}$$

$$J = 0$$

**$^3P$**

$$\begin{array}{l} L = 1 \\ S = 1 \end{array}$$

$$\begin{array}{l} J_1 = 2 \\ J_2 = 1 \\ J_3 = 0 \end{array}$$

**$^1D$**

$$\begin{array}{l} L = 2 \\ S = 0 \end{array}$$

$$J = 2$$

$2S + 1$

$$\boxed{L} \quad J$$

$$^1S \longrightarrow ^1S_0$$

$$^3P \longrightarrow ^3P_2 \quad ^3P_1 \quad ^3P_0$$

$$^1D \longrightarrow ^1D_0$$

## Как располагаются подтермы на шкале энергии?

---

**3-е правило Хунда:**

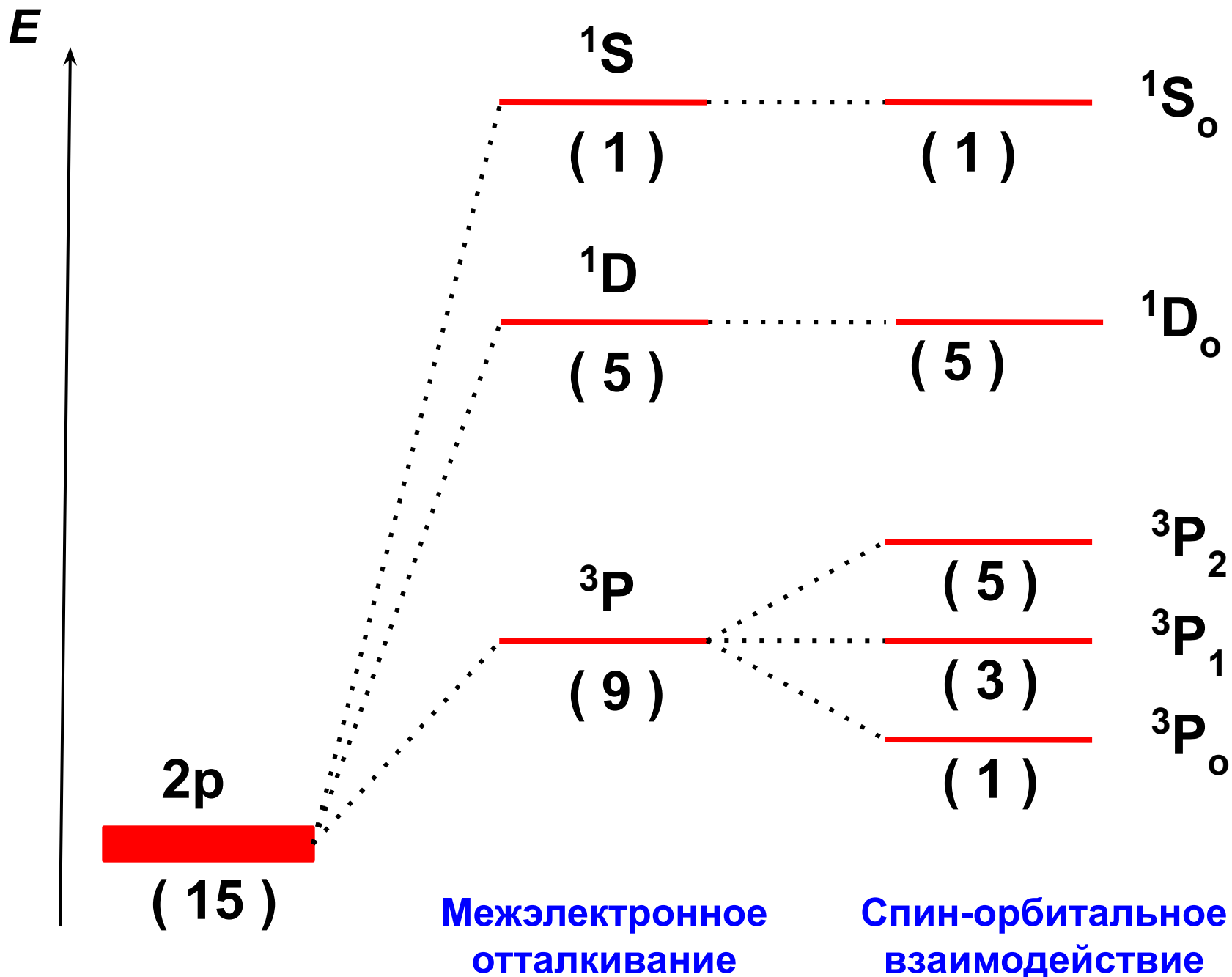
**Вариант А:** если подоболочка заполнена наполовину и менее ( $v \leq 2\ell + 1$ ), то минимальная энергия соответствует подтерму с минимальным квантовым числом  $J$

**Вариант Б:** если подоболочка заполнена более, чем наполовину ( $v > 2\ell + 1$ ), то минимальная энергия соответствует подтерму с максимальным квантовым числом  $J$

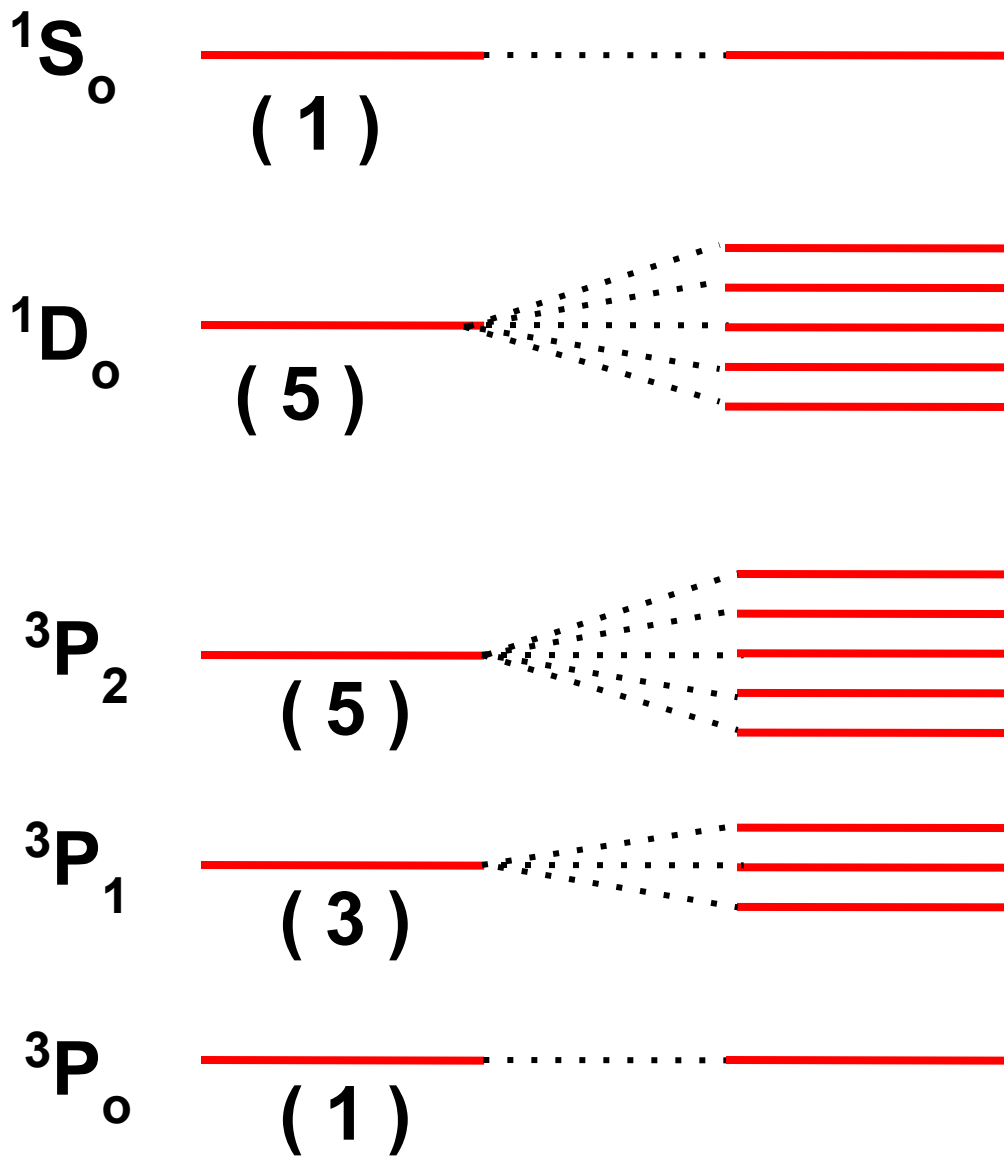
---

**Для атома углерода реализуется вариант А**

$$(v = 2 \leq 3 = 2\ell + 1)$$

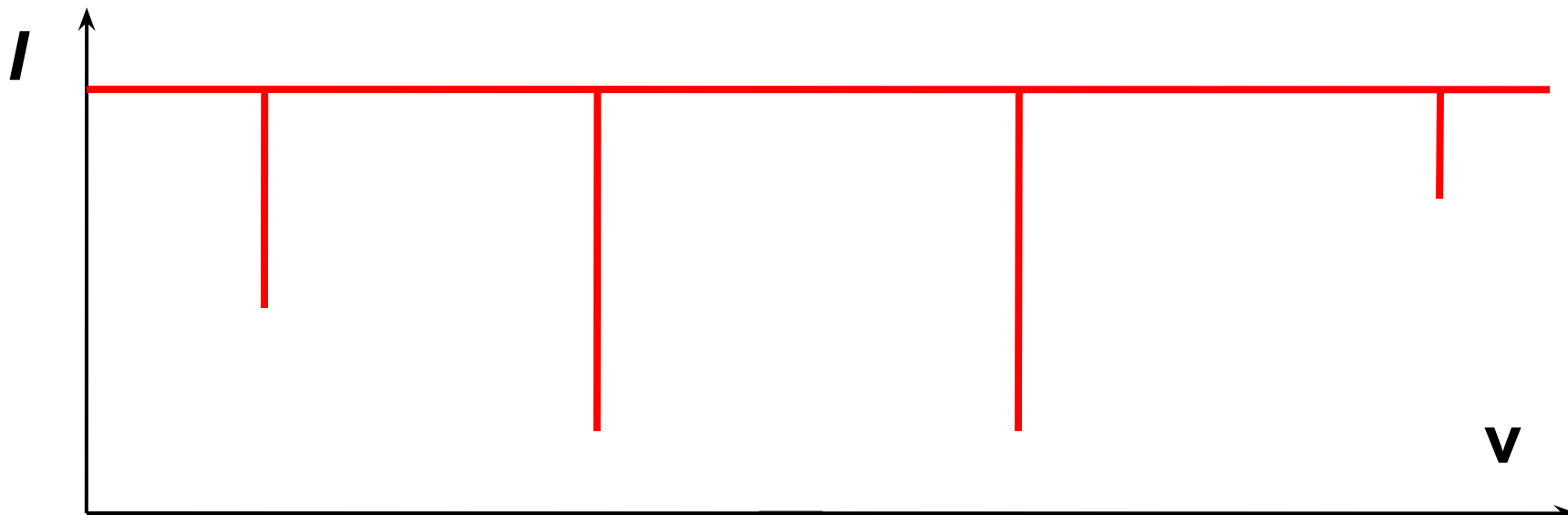


$E$

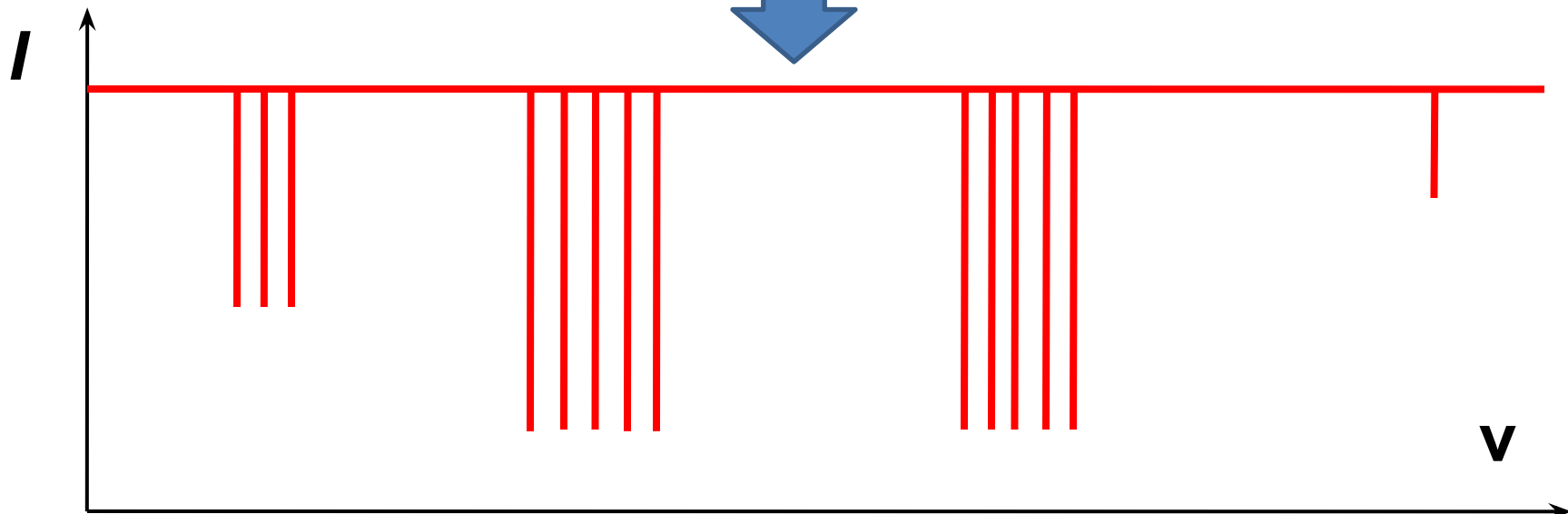


Каждое состояние имеет свою энергию

Внешнее магнитное поле (эффект Зеемана)



**МАГНИТНОЕ ПОЛЕ**



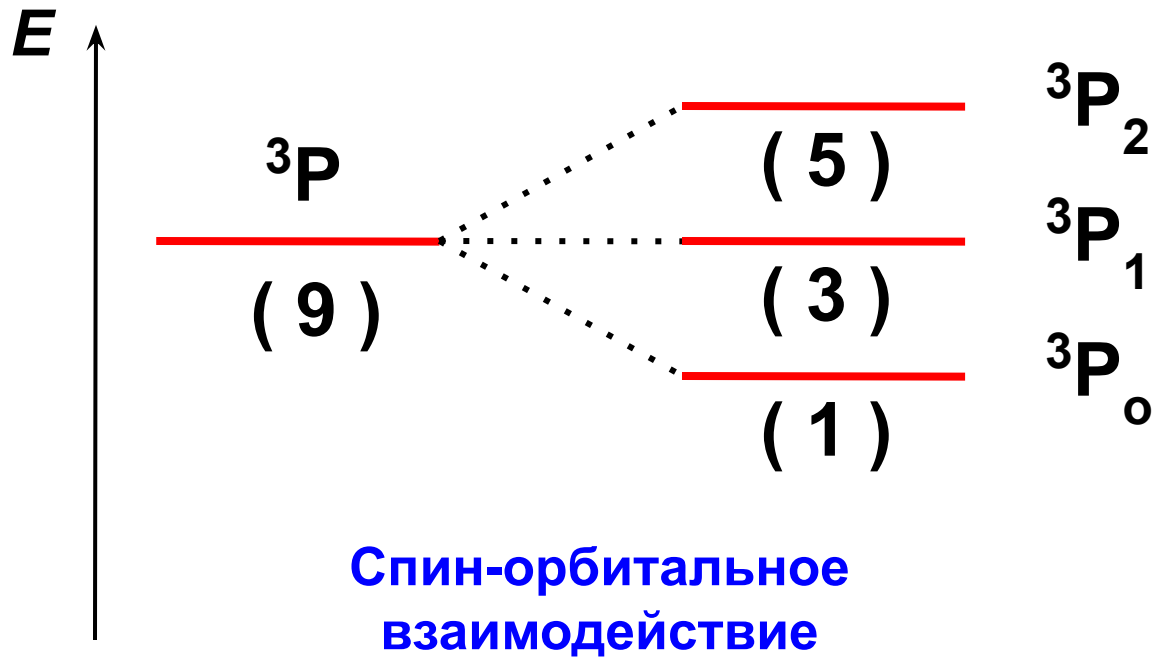
# Домашнее задание

## Задача 7.1.

Для указанного атомного терма определить характер расщепления за счет спин-орбитального взаимодействия.

Изобразить энергетическую диаграмму с учетом правил Хунда.

Для каждого уровня указать степень вырождения и число стационарных состояний атома.



**Задача 7.2.** Расположить указанные атомные термы на шкале энергии

