

Кислицын А.А.
Физика атома, атомного
ядра и элементарных
частиц

19(1). Полный момент импульса
электрона в атоме. Символические
обозначения термов. Правила отбора
для оптических переходов.

Операции с векторами орбитального момента L и спина S можно производить с помощью следующего полуклассического метода. Вектора складываются по обычным правилам параллелограмма:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad (19.1)$$

в результате получается вектор \mathbf{J} - вектор полного момента импульса электрона.

Но в это чисто классическое правило надо внести две поправки, взятые из 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, при которых его проекция на направление \mathbf{J} равна $m\hbar$,

$$\text{где } m = 0, \pm 1, \dots, \pm l.$$

Аналогичное требование предъявляется и к ориентации вектора \mathbf{S} : его проекция на направление \mathbf{J} должна быть равна $m_s\hbar$,

$$\text{где } m_s = \pm 1/2.$$

Таким образом, угол между \mathbf{L} и \mathbf{S} не может быть любым, а принимает ряд дискретных значений.

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

$$J = \hbar \sqrt{j(j+1)} \quad (19.2)$$

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

$$j = l + s, l + s - 1, l + s - 2, \dots, |l - s| \quad (19.3)$$

Формула (19.3) 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:

$$j = l + 1/2 \quad \text{и} \quad j = l - 1/2 \quad (19.4)$$

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:

$$J_Z = m_j \hbar, \quad (19.5)$$

где $m_j = j, j-1, j-2, \dots, -j$ (19.6)

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.

Полный механический момент (спин) атома

Ядро атома также обладает собственным механическим моментом (спином) $\mathbf{J}_Я$, поэтому полный механический атома равен сумме моментов ядра $\mathbf{J}_Я$ и электронной оболочки $\mathbf{J}_Э$:

$$\mathbf{J}_A = \mathbf{J}_Я + \mathbf{J}_Э, \quad (19.7)$$

где

$$|\mathbf{J}_A| = \hbar \sqrt{J_A(J_A + 1)}. \quad (19.8)$$

Число J_A называется внутренним квантовым числом всего атома, и может принимать значения

$$J_A = J_Я + J_Э, J_Я + J_Э - 1, \dots, |J_Я - J_Э|. \quad (19.9)$$

(Выше мы обозначали полный момент электронной оболочки и соответствующее внутреннее квантовое число буквами \mathbf{J} и J без индексов).

Полный магнитный момент атома

Каждое ядро с ненулевым спином имеет магнитный момент $\mu_{Я}$, направление которого с точностью до знака совпадает с направлением спина:

$$\mu_{Я} = g\mu_{Я}J_{Я} \quad (19.10)$$

где $J_{Я}$ - спин ядра, g - гиромагнитное отношение ядра, $\mu_{Я}$ - ядерный магнетон:

$$\mu_{Я} = \frac{e\hbar}{2m_p} \quad (19.11)$$

Полный магнитный момент атома равен сумме магнитных моментов ядра и электронной оболочки:

$$\mu_A = \mu_{Я} + \mu_{Э} \quad (19.12)$$

Правила суммирования векторов $\mu_{Я}$ и $\mu_{Э}$ такие же, какие мы применили для векторов μ_l и μ_s для определения полного магнитного момента электрона.

Полный магнитный момент атома

Ядерный магнетон (19.11) отличается от магнетона Бора μ_0 (формула (15.4)) тем, что в знаменателе вместо массы электрона стоит масса протона, т.е. $\mu_{\text{Я}}$ почти в 2000 раз меньше, чем μ_0 . Поэтому магнитный момент ядра $\mu_{\text{Я}}$ обычно на 3 порядка меньше магнитного момента электронной оболочки.

Отсюда следует, что обычно вклад магнитного момента ядра в магнитный момент атома мал, и определяет сверхтонкое расщепление линий спектра атома. Однако у некоторых атомов магнитный момент электронной оболочки равен нулю (например, у инертных газов). Тогда полный момент атома равен магнитному моменту ядра, роль которого в этом случае становится определяющей.

Вернемся к электронной оболочка атома.

Изложенные выше 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. Общий вид такого обозначения:

$${}^{\kappa}L_J \quad (19.13)$$

где квантовое число L обозначает орбитальный момент всей электронной оболочки атома по тем же правилам, что и для отдельного электрона:

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

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

$$\kappa = 2S + 1 \quad (19.14)$$

где S – спиновое квантовое число всей электронной оболочки 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

$$k = \frac{1}{\lambda} = T_m - T_n \quad (19.15)$$

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 практически 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:

$$\Delta l = \pm 1 ; \quad \Delta m = 0 ; \quad \pm 1 \quad (19.16)$$

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 (19.16) 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

$$D_{mn} = ex_{mn} = \int \psi_m^* ex \psi_n dx \quad (19.17)$$

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.

Уровни энергии атома водорода.
Толщина линии соответствует вероятности перехода.

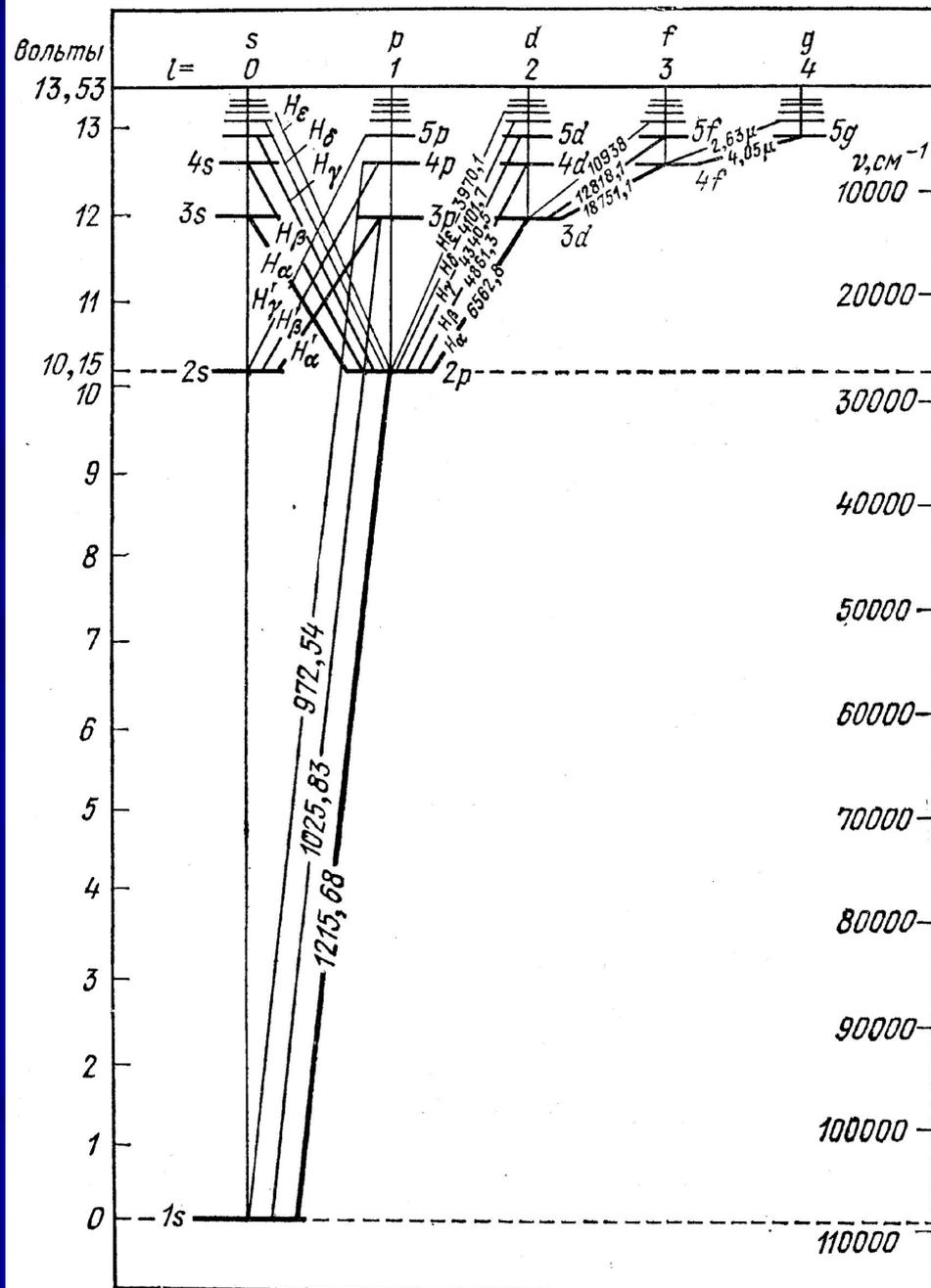


Схема уровней энергии атома лития

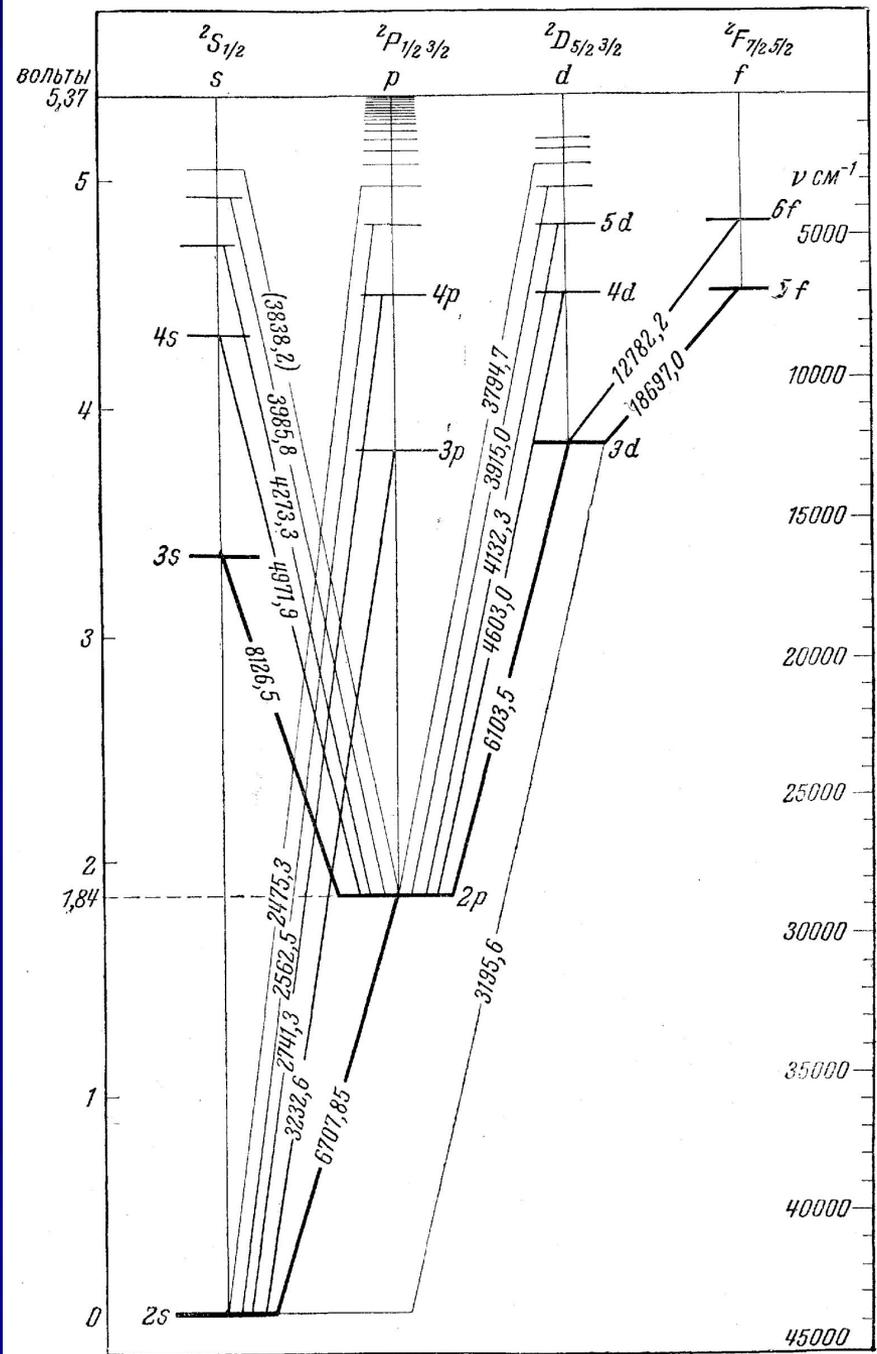


Схема уровней энергии атома натрия

