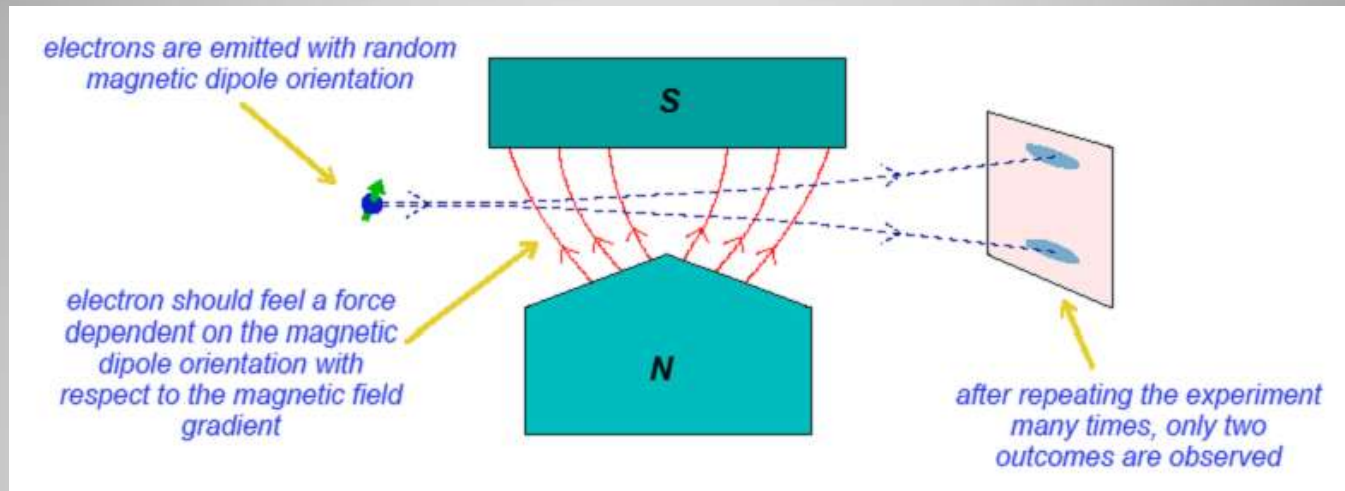
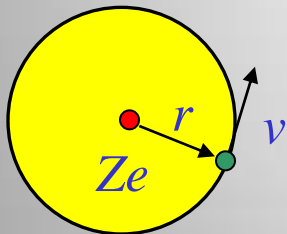


Электронный спин



Магнитный момент электрона в атоме



$$p_m = I \cdot A = \frac{-e\pi r^2}{T}, \quad T = \frac{2\pi r}{v}$$

$$p_m = \frac{-e}{2m} l \rightarrow P_m = \frac{-e\hbar}{2m} (L/\hbar) = -\beta_e (L/\hbar)$$

$$P_s = -2\mu_B (S/\hbar), \quad \mu_B \sim 0,927 \times 10^{-23} \text{ Дж/Тл}$$

Атомные термы

$$\mathbf{H}\Psi = E\Psi$$

$$\mathbf{L}^2 |\Psi(L, S, M_L, M_S)\rangle = \hbar^2 L(L+1) |\Psi(L, S, M_L, M_S)\rangle$$

$$\mathbf{L}^z |\Psi(L, S, M_L, M_S)\rangle = \hbar M_L |\Psi(L, S, M_L, M_S)\rangle$$

$$\mathbf{S}^z |\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2} |\alpha\rangle, \quad \mathbf{S}^z |\beta\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\beta\rangle$$

$$\mathbf{S}^2 |\Psi(L, S, M_L, M_S)\rangle = \hbar^2 S(S+1) |\Psi(L, S, M_L, M_S)\rangle$$

$$\mathbf{S}^z |\Psi(L, S, M_L, M_S)\rangle = \hbar M_S |\Psi(L, S, M_L, M_S)\rangle$$

Полный момент количества движения электронной оболочки

$$\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{L}} + \vec{\mathbf{S}} : j = l + s, l + s - 1, \dots, |l - s|$$

Угловой момент двух электронов

$$[L_{1,i}, L_{2,j}] = 0 \rightarrow \Psi(L_1, M_1, L_2, M_2)$$

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 \rightarrow [L_x, L_y] = [L_{1,x} + L_{2,x}, L_{1,y} + L_{2,y}]$$

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_{1,z} + i\hbar L_{2,z} = i\hbar L_z$$

Ряд Клебша -Гордана

$$l = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots, |l_1 - l_2|$$

Оператор L^2 коммутирует со всеми своими компонентами

$$L^2 = (\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2)^2 \rightarrow [L^2, L_1^2] = [L^2, L_2^2] \rightarrow \Psi(L_1, L_2, L, M)$$

$$[L_{1,z}, L^2] = [L_{1,z}, L_x^2] + [L_{1,z}, L_y^2] + [L_{1,z}, L_z^2]$$

$$[L_{1,z}, L^2] = 2i\hbar (L_{1,y}L_{2,x} - L_{1,x}L_{2,y}) \neq 0$$

Принцип запрета Паули

Принцип неопределенности Гейзенберга → принцип неразличимости одинаковых частиц

$$P\Psi(\xi_1, \xi_2) = \Psi(\xi_2, \xi_1) = \exp(i\varphi)\Psi(\xi_1, \xi_2)$$

$$P[P\Psi(\xi_1, \xi_2)] = \Psi(\xi_1, \xi_2) = \exp(2i\varphi)\Psi(\xi_1, \xi_2)$$

$$P\Psi(\xi_1, \xi_2) = \pm\Psi(\xi_1, \xi_2)$$

Статистика Ферми-Дирака: фермионы (частицы с полуцелым спином)
Статистика Бозе-Эйнштейна: бозоны (частицы с целым спином)

Волновая функция двух не взаимодействующих электронов

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\varphi_1(\xi_1)\varphi_2(\xi_2) - \varphi_1(\xi_2)\varphi_2(\xi_1) \right]$$

Принцип запрета Паули: два электрона не могут одновременно находиться в одном квантовом состоянии

Многоэлектронная волновая функция

$$\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det [\varphi_1(\xi_1) \varphi_2(\xi_2) \dots \varphi_N(\xi_N)]$$

Электрическое взаимодействие не зависит от спина

$$\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \Phi(r_1, r_2, \dots, r_N) \Theta(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$$

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = \begin{cases} \Phi_s(r_1, r_2) \Theta_a(\sigma_1, \sigma_2), & S^2 \Theta_a = 0 \\ \Phi_a(r_1, r_2) \Theta_s(\sigma_1, \sigma_2), & S^2 \Theta_s = 2\hbar^2 \Theta_s \end{cases}$$

Правило Хунда:

Наименьшей энергией обладает терм с наибольшим возможным при данной электронной конфигурации значением S и наибольшим возможным при этом S значением L .

Классификация атомных термов

$$He : 1s^2$$

$$S^z = 0, L^z = 0 \rightarrow S = 0, L = 0$$

m_l	0	0
m_s	1/2	- 1/2

$$C : 1s^2 2s^2 2p^2 \rightarrow p^2$$

$$S = 1, L = 0, 1$$

m_l	1	0
m_s	1/2	1/2

$$\max(L^z = 1 + 0) = 1 \rightarrow S = 1, L = 1$$

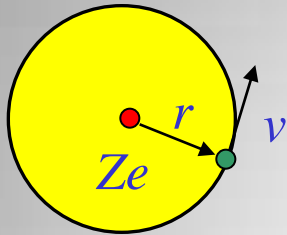
Орбитальный момент и спин основного состояния эквивалентных электронов определяются принципом запрета Паули и правилом Хунда

При слабом спин-орбитальном взаимодействии терм задается тремя квантовыми числами L , S и J (термы Рассела -Саундерса)

$$^{2S+1}L_J : {}^1S_0, {}^3P_{0,(1,2)}$$

Спин - орбитальное взаимодействие

Тонкая структура атомных спектров



$$\vec{H} = -\frac{Ze}{cr^3} (\vec{v}_e \times \vec{r}) = \frac{Ze\hbar}{m_e cr^3} \vec{I} = \frac{Z}{r^3} 2\beta_e \vec{I}$$

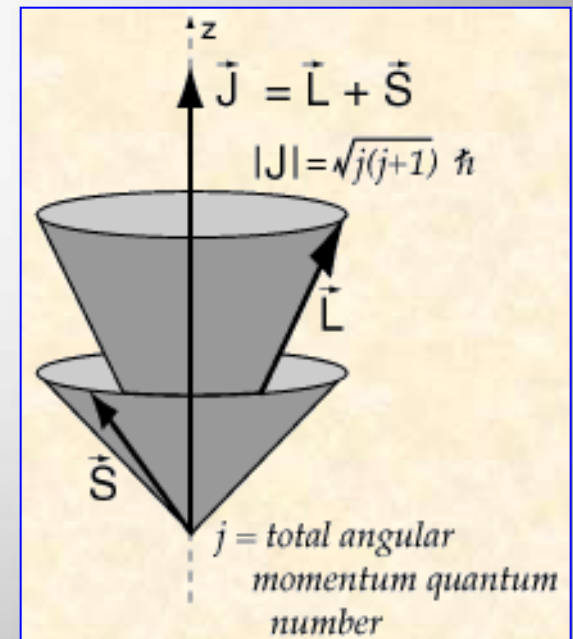
$$E = -\vec{H} \cdot \vec{p}_s = (2\beta_e)^2 \frac{Z}{r^3} \vec{s} \cdot \vec{I} = a (\vec{s} \cdot \vec{I}), \quad (a > 0)$$

$$r \sim Z^{-1} \rightarrow E \sim Z^4$$

Термы Рассела-Саундерса - сохраняются орбитальный и спиновый моменты. (Z=1-31)

$$H = \sum_{i=1}^n a_i (\vec{s}_i \cdot \vec{l}_i) = \frac{a}{n} (\vec{S} \cdot \vec{L}), \quad n \leq 2l+1$$

$$\mathbf{J}^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2(\mathbf{L} \cdot \mathbf{S})$$



Нормальные и обращенные мультиплеты

Нормальные мультиплеты: $n \leq 2l+1$

$$2\langle\Psi|(\mathbf{L}\cdot\mathbf{S})|\Psi\rangle=\langle\Psi|\mathbf{J}^2-\mathbf{L}^2-\mathbf{S}^2|\Psi\rangle$$

$$E=\frac{a}{2n}\left[J(J+1)-S(S+1)-L(L+1)\right]$$

$$J=|L-S|, \quad n \leq 2l+1$$

Обращенные мультиплеты: $n > 2l+1$

$$\mathbf{H}=a\sum_{i=1}^n(\vec{s}_i\cdot\vec{l}_i)=a\left[\sum_{i=1}^{4l+2}(\vec{s}_i\cdot\vec{l}_i)-\sum_{i=n+1}^{4l+2}(\vec{s}_i\cdot\vec{l}_i)\right]=-\frac{a}{4l+2-n}(\vec{S}\cdot\vec{L})$$

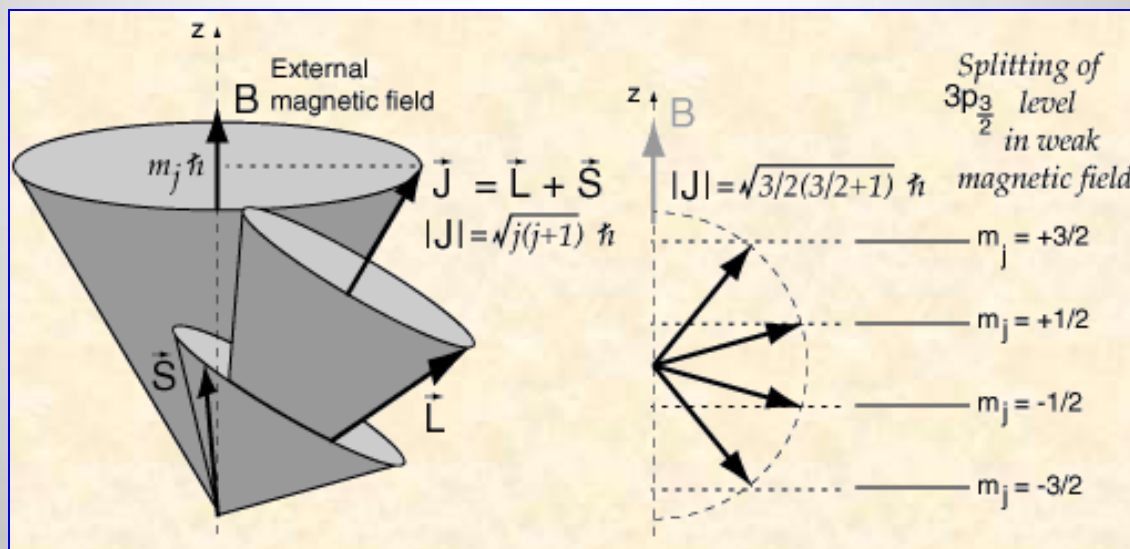
$$E=\frac{a}{2(4l+2-n)}\left[L(L+1)+S(S+1)-J(J+1)\right]$$

$$J=L+S, \quad 4l+2 > n > 2l+1$$

Эффект Зеемана

Расщепление энергетических уровней атома во внешнем магнитном поле

$$\Delta E = -\langle \Psi | \mathbf{p}_m^z \cdot \mathbf{H} | \Psi \rangle$$



$$N = 2J + 1$$

Фактор Ланде

$$\Delta E = \beta_e H \langle \Psi | \vec{L}^z + 2\vec{S}^z | \Psi \rangle = \beta_e H \langle \Psi | \vec{J}^z + \vec{S}^z | \Psi \rangle$$

$$\vec{S}_J = (\vec{S} \cdot \vec{n}) \vec{n}, \quad \vec{n} = \frac{\vec{J}}{\sqrt{J(J+1)}}$$

$$E = \beta_e H^z J^z \left(1 + \frac{\langle \Psi | \vec{J} \cdot \vec{S} | \Psi \rangle}{J(J+1)} \right) = g \beta_e H^z J^z$$

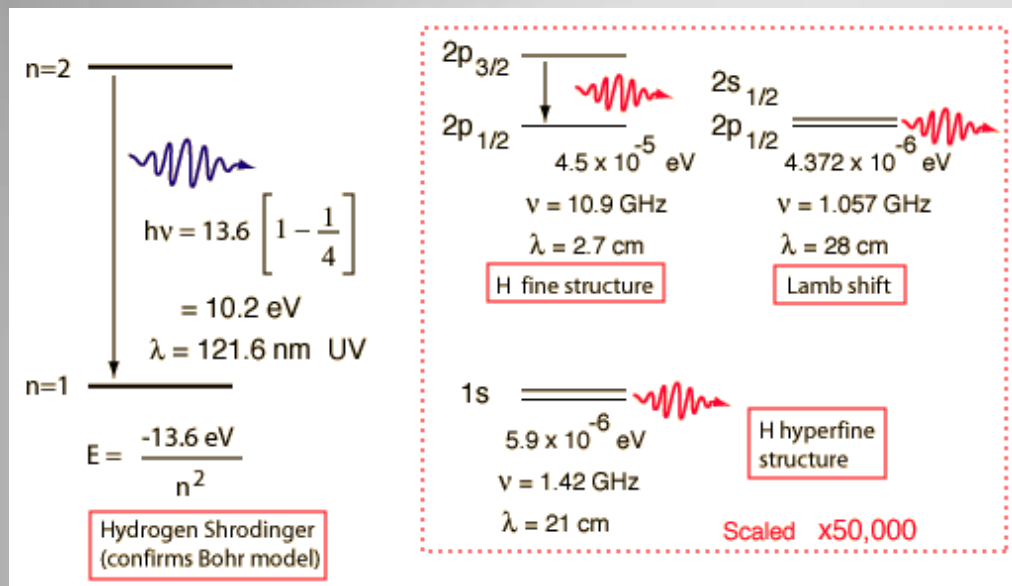
$$(\mathbf{J} - \mathbf{S})^2 = \mathbf{L}^2 \rightarrow 2(\mathbf{J} \cdot \mathbf{S}) = \mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - \mathbf{L}^2$$

$$2\langle \Psi | (\vec{J} \cdot \vec{S}) | \Psi \rangle = \langle \Psi | J(J+1) + S(S+1) - L(L+1) | \Psi \rangle$$

Фактор Ланде:

$$g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

Сверхтонкое расщепление

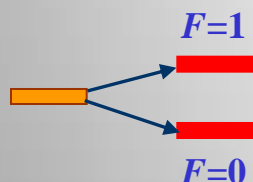


$$\mathbf{P}_m = g_N \beta_N \vec{\mathbf{I}}$$

$$\beta_N = \frac{e \hbar}{2m_p} = 5.05 \cdot 10^{-27} \text{ Дж/Тл}$$

$$g(^1\text{H})=5.585, g(^{17}\text{O})=-0.7572$$

$$\vec{\mathbf{F}} = \vec{\mathbf{J}} + \vec{\mathbf{I}}$$



$$\mu_B = 1840 \beta_N \rightarrow \Delta_{IJ} \sim 0.001 \times \Delta_{SL}$$

$$^1\text{H}: J=1/2, I=1/2 \rightarrow F=0, 1$$

$$^1\text{H} (F=0, 1) : \Delta E = 5.9 \cdot 10^{-6} \text{ e.V. } (\lambda=21 \text{ см})$$

Радиоастрономия: атомы водорода в космическом пространстве