

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{2mc} 2\vec{S} \quad (17)$$

здесь \vec{S} - механический спиновый момент импульса, множитель 2, выражающий аномальные гиромагнитные свойства спина, является эмпирическим фактором (**гиромагнитный фактор для орбитального движения равен 1**). Как всякий момент импульса, спиновый момент согласно квантовой механике имеет свойство:

$$\left| \vec{S} \right|^2 = \hbar^2 S (S+1) ; \quad (18)$$

$S = 1/2$ - спиновое квантовое число электрона.

В системе отсчета, связанной с электроном и движущейся вместе с ним в электрическом поле ядра, индуцируется магнитное поле обусловленное движением (в этой системе !) заряженного ядра. При $\mathbf{v} \ll c$ это поле есть :

$$\vec{H} = \frac{1}{c} \left[\vec{E} \times \vec{v} \right] \quad (19)$$

Вообще говоря, эта формула справедлива для инерциальной системы отсчета - неускоренного движения электрона; учет ускорения приводит к появлению в этой формуле множителя 1/2 - множителя Томаса - Френкеля.

$$\vec{H} = \frac{1}{2c} \left[\vec{E} \times \vec{v} \right] \quad (20)$$

Энергия взаимодействия спин-орбитального магнитного момента (17) с этим полем (20) - энергия спин-орбитального взаимодействия - одинакова (с точностью до членов $\sim \mathbf{v}^2 / c^2$) в обеих системах координат - связанных и с электроном и с ядром:

$$\delta U = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{H} \quad (21)$$

Подставляя в (20) электрическое поле ядра $\vec{\mathbf{E}} = Z e \vec{r} / r^3$ находим, что магнитное поле коллинеарно орбитальному моменту импульса \vec{l} :

$$\vec{H} = \frac{Ze}{2mc r^3} \left[\vec{r} \cdot \vec{p} \right] = Z \frac{e}{2mc} \frac{\vec{l}}{r^3} ; \quad (22)$$

разумеется, орбитальный момент импульса (*как и всякий момент импульса!*) имеет свойство

$$\left| \vec{l} \right|^2 = \hbar^2 l(l+1). \quad (23)$$

Для энергии спин-орбитального взаимодействия, таким образом, получаем:

$$\delta U_{ls}(r) = Z \left(\frac{e}{2mc} \right)^2 \frac{1}{r^3} 2 \vec{l} \cdot \vec{s} ; \quad (24)$$

Существенно, что это взаимодействие зависит от угла между моментами импульса \vec{l} и \vec{s} .

Квантовая механика дает следующий рецепт для вычисления скалярного произведения моментов: квадраты моментов в выражении для квадрата суммарного (полного) момента импульса

$$\left| \vec{j} \right|^2 = \left| \vec{l} + \vec{s} \right|^2 = \left| \vec{l} \right|^2 + \left| \vec{s} \right|^2 + 2 \cdot \vec{l} \cdot \vec{s}$$

следует заменить их значениями, выраженными через квантовые числа моментов

$$\hbar^2 j(j+1) = \hbar^2 l(l+1) + \hbar^2 s(s+1) + 2 \vec{l} \cdot \vec{s} \quad . \quad (25)$$

Подставляя (25) в (24) и усредняя затем полученное выражение по положениям электрона найдем величину энергии спин-орбитального взаимодействия :

$$\delta E_{ls} = Z \left(\frac{e\hbar}{2mc} \right)^2 \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] ; \quad (26)$$

здесь $e\hbar/2mc = \mu$ - магнетон Бора. Эта поправка к энергии уровня «выглядит как» энергия взаимодействия точечных магнитных моментов, равных магнетону Бора, разнесенных на расстояние $\sim r$, механизм же спин-орбитального взаимодействия, описанный выше, не соответствует концепции точечных магнитных моментов.

Воспользовавшись формулами (15), получим окончательное выражение для энергии спин-орбитального взаимодействия :

$$\delta E_{ls} = E_0 \frac{(\alpha Z)^2}{n} \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2l(l+1/2)(l+1)} \quad . \quad (27)$$

Зависимость от угла между взаимодействующими моментами \vec{l} и \vec{s} проявляется в (27) в величине квантового числа суммарного момента j , а именно, в зависимости от взаимной ориентации \vec{l} и \vec{s} квантовое число j (для одного электрона) может принимать два значения

$$j = l + s = l + 1/2 \quad ; \quad (28)$$

$$j = l - s = l - 1/2 \quad ; \quad (29)$$

результатом являются два значения поправки (27) для каждого значения l и, следовательно, расщепление уровня энергии с заданными квантовыми числами n, l ($E_{nl} = E_0 + \delta E_p$) на два уровня с различными величинами полного момента импульса j .

Из формулы (27) видно, что $\delta E_{ls} \cong \alpha^2 E_0$. Таким образом, оба эффекта - собственно релятивистский и связанный со спин-орбитальным взаимодействием имеют один и тот же порядок величины: $\alpha^2 E_0 (\cong 10^{-3} \text{ эВ})$; энергетическая поправка δE_{ls} должна быть учтена, следовательно, совместно с релятивистской поправкой при определении энергии электрона в атоме. Таким образом, энергия атома равна

$$E = E_0 + \delta E_p + \delta E_{ls} . \quad (30)$$

Подставляя в (30) соотношения (16), (27), для обоих возможных значений полного момента $j = l \pm 1/2$ получим :

$$\begin{aligned} E_{n,j} &= E_0 + \Delta E_{ls} = E_0 + \delta E_p + \delta E_{ls} = \\ &= E_0 \left\{ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right\} . \end{aligned} \quad (31)$$

Таким образом, суммарная поправка есть

$$\begin{aligned} \Delta E_{n,j} &= \delta E_p + \Delta E_{ls} = E_0 \frac{\alpha^2 Z^4}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) = \\ &= -Ry \frac{\alpha^2 Z^4}{n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) . \end{aligned} \quad (32)$$

Отметим, что сдвинутые и расщепленные релятивистскими эффектами уровни оказываются ниже бальмеровского $E_n = -Ry/n^2$. Таким образом, вследствие влияния обоих факторов все уровни одноэлектронного атома, согласно (31) расщепляются на два подуровня по числу возможных значений квантового числа j , (S -уровни не расщепляются, j имеет единственное значение $j = s = 1/2$). Это расщепление, поскольку его масштаб мал ($\approx \alpha^2 E_0$; $\alpha = 1/137$), называется **тонким расщеплением. Поэтому безразмерная постоянная α , определяющая масштаб расщепления, называется **постоянной тонкой структуры**. Из**

(31, 32) следует, что величина расщепления уровня (разность энергий между подуровнями $j_1 = l + 1/2$ и $j_2 = l - 1/2$ одного и того же уровня n, l) равна :

$$\Delta E_{j_1 j_2} = Ry \frac{\alpha^2 Z^4}{n^3} \frac{1}{l(l+1)} . \quad (33)$$

Из (33) видно, что величина расщепления уровня сильно зависит от заряда ядра ($\sim Z^4$) и быстро убывает с увеличением главного ($\sim 1/n^3$) и орбитального ($\sim 1/l^2$) квантовых чисел .

Согласно современной теории атома (это частично видно из изложенного выше) состояние электрона в атоме может быть задано набором из четырех квантовых чисел, например:

$$n, l, j, m_j . \quad (34)$$

Главное квантовое число n определяет в первом, самом грубом, приближении энергию электрона в атоме и принимает значения из натурального ряда:

$$n = 1, 2, 3, \dots . \quad (35)$$

Орбитальное квантовое число l , определяющее величину квадрата момента количества движения $\hbar^2 l(l+1)$, ограничено условием

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1. \quad (36)$$

При заданном n имеется n состояний, отличающихся величиной квантового числа l . Состояния одного электрона, отличающиеся величиной орбитального квантового числа, принято обозначать **строчными** латинскими буквами в соответствии со схемой :

$l =$	0	1	2	3	4	5
СИМВОЛ							
СОСТОЯНИЯ	s	p	d	f	g	h

Квантовое число полного момента импульса j (внутреннее квантовое число) определяет величину квадрата полного момента импульса электрона в атоме $\hbar^2 j(j+1)$ и принимает значения $j = l \pm 1/2$.

Магнитное квантовое число m_j определяет величину проекции полного момента импульса электрона на какое-либо направление (например, на направление магнитного поля) и принимает, при заданном j значения :

$$m_j = j, j-1, \dots, -j. \quad (38)$$

то есть $2j + 1$ значение.

Если внешних полей нет, то, несмотря на то, что состояние движения электрона в атоме характеризуется четырьмя квантовыми числами, энергия электрона в атоме водорода зависит от двух квантовых чисел n и j , (см.(31)).

Для обозначения состояния **одного** электрона в атоме применяется специальная символика, то есть, определенная форма записи набора квантовых чисел. **Записывается главное квантовое число, затем строчная латинская буква, соответствующая орбитальному квантовому числу, внизу справа от этой буквы - значение внутреннего квантового числа j :**

$$n l_j$$

Основное состояние электрона в атоме водорода есть: $1 s_{1/2}$, этому соответствуют квантовые числа : $n = 1, l = 0, j = 1/2$.

Схема энергетических уровней атома водорода с учетом тонкой структуры изображена на Рис.2. **Обратим внимание на равенство энергий уровней с одинаковым полным моментом импульса и одинаковым главным квантовым числом - см.(31).**

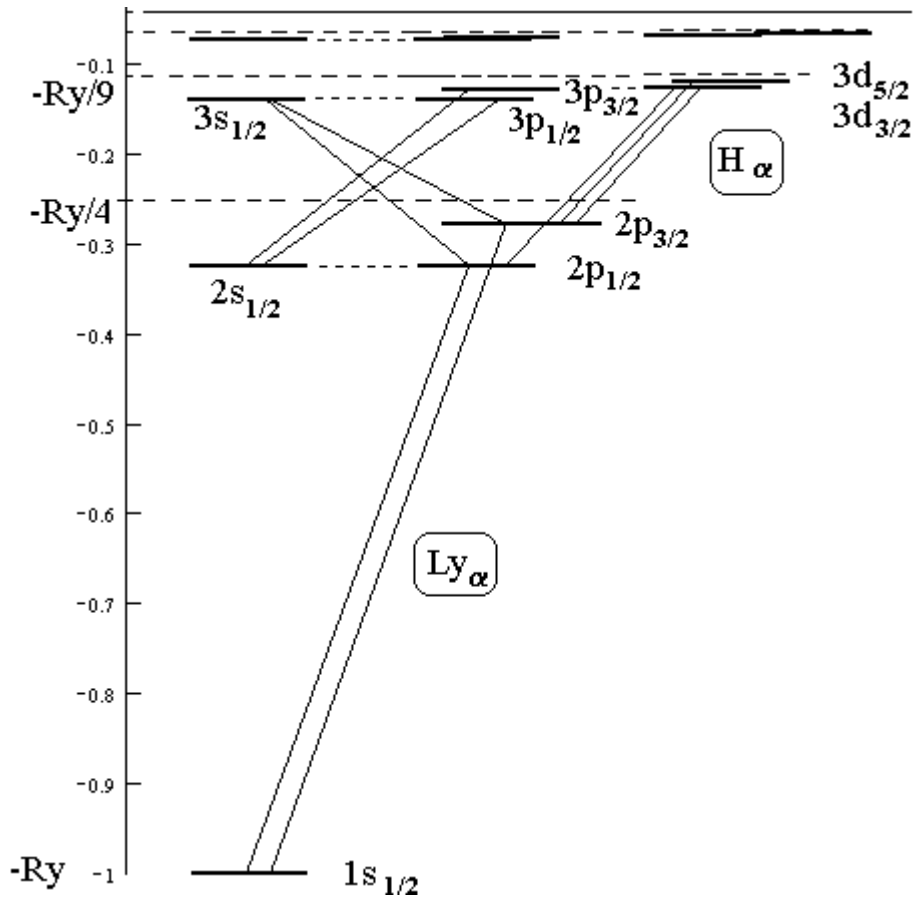


Рис.2. Схема тонкой структуры уровней энергии атома водорода (масштабы энергий не соблюдены, расщепления значительно увеличены), показаны переходы головных линий серий :

Лаймана - Ly_{α} $1s - 2p$

Бальмера - H_{α} $2s - 3p$, $2p - 3s$, $2p - 3d$.

Оптические переходы из одного состояния в другое подчиняются правилам отбора. Для электрических дипольных переходов (см. § 28 в [2]) эти правила гласят :

$$\begin{aligned} \Delta n & \text{ - произвольно ;} \\ \Delta l & = \pm 1 \quad ; \\ \Delta j & = 0, \pm 1 \quad . \end{aligned} \tag{39}$$

Если атом водорода находится в основном состоянии $1s_{1/2}$, то при возбуждении, согласно правилам отбора, возможны переходы только

в p -состояния и, тем самым, возможно появление линий серии Лаймана $1s - np$; линии серии Лаймана - дублеты (см. Рис.2).

Линии серии Бальмера возникают при переходах $2p - ns$, $2s - np$, $2p - nd$, $n = 3, 4, 5, \dots$. При этом, в согласии с правилами отбора, линии серии Бальмера обладают более сложной структурой, чем линии серии Лаймана. На Рис.2 представлена схема переходов, ответственных за линию H_α серии Бальмера. Вследствие того, что уровни $n s_{1/2}$ и $n p_{1/2}$, а также $n p_{3/2}$ и $n d_{3/2}$ совпадают, если не учитывать лэмбовского сдвига, каждая из линий серии Бальмера состоит (в этом приближении) из пяти компонент.

Зная энергетический спектр атома водорода, нетрудно найти «расстояние» $\Delta\lambda$ между линиями $\lambda_1 (n_1, j'_1 \leftrightarrow n_2, j'_2)$ и $\lambda_2 (n_1, j''_1 \leftrightarrow n_2, j''_2)$ для переходов между подуровнями расщепленных термов. Согласно (31), оно равно (поскольку расщепление мало, считаем $\lambda_1 \cdot \lambda_2 \cong \lambda^2$):

$$\Delta\lambda = \frac{\lambda^2}{\hbar c} (E_{n_2} - E_{n_1}) =$$

$$= \alpha^2 R \lambda^2 \left\{ \frac{1}{n_1^3} \left(\frac{1}{j'_1 + \frac{1}{2}} - \frac{1}{j''_1 + \frac{1}{2}} \right) - \frac{1}{n_2^3} \left(\frac{1}{j'_2 + \frac{1}{2}} - \frac{1}{j''_2 + \frac{1}{2}} \right) \right\} \quad (40)$$

здесь R - постоянная Ридберга; n_1, n_2 - главные квантовые числа; j'_1, j''_1, j'_2, j''_2 - соответствующие им квантовые числа полного момента импульса.

Линия H_α расщеплена на две группы линий (две и три линии); расщепление между группами обусловлено, в основном, расщеплением $2p$ -уровня, которое согласно (40) или (33) равно:

$$\Delta\lambda = \frac{1}{16} \lambda^2 \alpha^2 R. \quad (41)$$

На Рис.3а показаны переходы, ответственные за тонкую структуру бальмеровской линии H_{α} с учетом лэмбовского сдвига; на Рис.3б изображены спектры H_{α} - линии, полученные с помощью интерферометра Фабри – Перо (двугорбая кривая) и методами лазерной спектроскопии сверхвысокого разрешения.

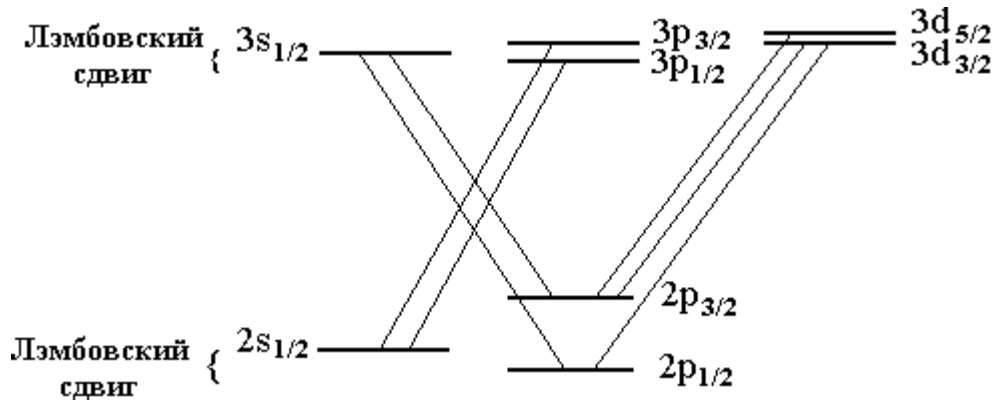


Рис.3а. Тонкая структура H_{α} - линии .

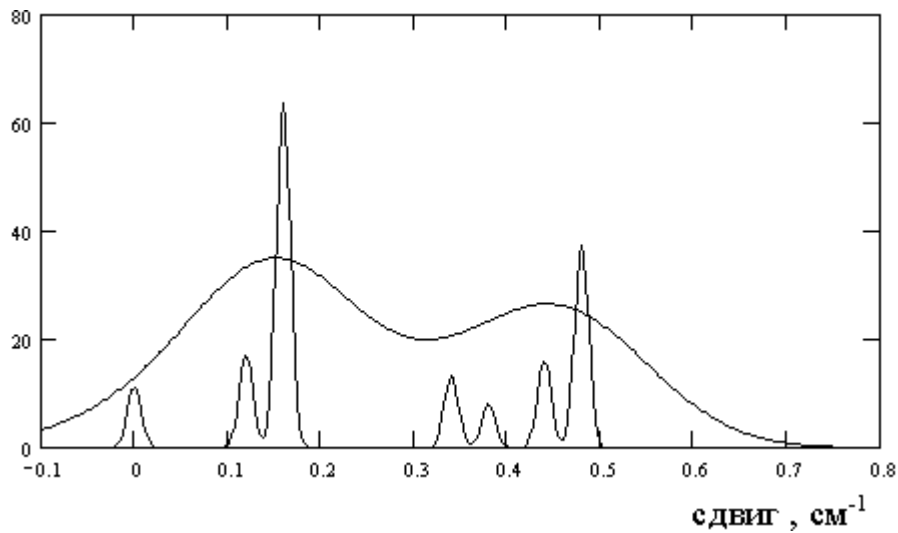


Рис.3б. Тонкая структура H_{α} - линии высокого и сверхвысокого разрешения .