

## Лекция 14 Уровни энергии и спектры атомов щелочных металлов

1 Модель валентного электрона

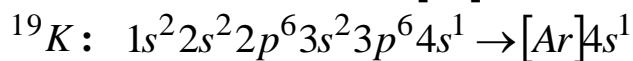
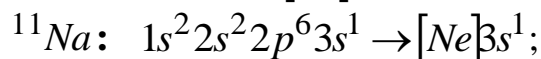
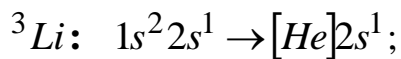
2 Квантовый дефект и снятие вырождения по орбитальному квантовому числу

3 Спектральные серии атомов щелочных металлов.

4 Дублетная структура спектральных линий как следствие спин-орбитального взаимодействия

Квантово-механический расчет сложных атомов, в состав которых входит несколько электронов, движущихся в поле ядра, является сложной математической задачей. Однако для атомов щелочных металлов (*Li*, *Na*, *K*, *Rb*, *Cs*, *Fr*), располагающихся в первой группе периодической системы элементов, задача может быть упрощена, а их спектральные свойства могут быть легко объяснены на основе расчета, аналогичного проведенному при решении задачи о водородоподобном атоме. Возможность отмеченного упрощения может быть обоснована следующим образом.

Электронные конфигурации атомов щелочных металлов в основном состоянии таковы:



и т.д. Общей закономерностью их электронного строения является то, что совокупность  $(Z - 1)$  электронов полностью заполняет внутренние оболочки атома (это соответствует электронной конфигурации атома инертного газа из предыдущего периода системы элементов), а один электрон (валентный) расположен во внешней  $ns$ -оболочке. Известно, что атомы инертных газов характеризуются высокой устойчивостью, тогда как атомы щелочных металлов легко ионизируются. Таким образом, электроны внутренних оболочек с общим отрицательным зарядом  $-(Z - 1)e$  вместе с ядром, положительный заряд которого  $+Ze$ , образуют устойчивый «остов» атома с суммарным зарядом  $+e$ . В поле этого остова, называемого также *эффективным ядром*, движется валентный (оптический) электрон.

Следовательно, электронное строение атома щелочного металла имеет аналогию со строением водородоподобного атома, что и является основанием для использования методики решения квантово-механической задачи об атоме водорода (смотри лекцию 10). Однако при этом следует обратить внимание на следующее существенное отличие атома щелочного металла от атома водорода. В атоме водорода единственный электрон, состояние которого полностью определяет состояние атома, движется в

поле, создаваемое ядром. Так как линейные размеры ядра ( $\sim 10^{-15}$  м) во много раз меньше среднего расстояния между электроном и ядром ( $\sim 10^{-10}$  м), то заряд ядра можно считать точечным, а создаваемое им поле – кулоновским (потенциальная энергия электрона  $U = -\gamma Ze^2/r$ ). В атоме щелочного металла поле, в котором движется валентный электрон, создается остовом, линейные размеры которого сравнимы со средним расстоянием от валентного электрона до ядра. В результате этого данное поле, оставаясь приближенно сферически-симметричным, зависит от  $r$  по закону, отличающемуся от  $U = -\text{const}/r$ .

Рассматривая остов как сложную объемную систему с суммарным зарядом  $+e$ , обладающую сферической симметрией, потенциальную энергию  $U(r)$  валентного электрона в поле эффективного ядра можно представить в виде разложения  $U(r)$  в ряд по степеням  $1/r$ :

$$U(r) = -\gamma \frac{e^2}{r} - C_1 \gamma \frac{e^2}{r^2} - C_2 \gamma \frac{e^2}{r^3} - \dots, \quad (14.1)$$

в котором первое слагаемое соответствует полю, создаваемому точечным зарядом  $q = +e$ , а остальные слагаемые являются поправками, обусловленными распределением заряда электронов остова по его объему.

Ограничиваясь двумя первыми членами разложения (14.1) и преобразуя уравнение Шрёдингера аналогично тому, как это было сделано для атома водорода, получим для угловой функции  $Y(\theta, \varphi)$  уравнение, полностью совпадающее с (10.4), а для радиальной функции  $R(r)$  – уравнение

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ E + \gamma \frac{e^2}{r} - \frac{\hbar^2}{2mr^2} [ l(l+1) - C_1 \gamma \frac{2me^2}{\hbar^2} ] \right\} R = 0 \quad (14.2)$$

Сравнивая (14.2) с радиальным уравнением для водорода (10.13)

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E + \gamma \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R = 0,$$

видим, что эти уравнения отличаются друг от друга только наличием в (14.2) слагаемого  $-C_1 \gamma \frac{2me^2}{\hbar^2}$ , которое обусловлено учётом в выражении (14.1) для потенциальной энергии  $U(r)$  второго члена разложения, равного  $-C_1 \gamma \frac{e^2}{r^2}$ . Уравнения (10.13) и (14.2) формально тождественны, если положить в (14.2)

$$l(l+1) - C_1 \gamma \frac{2me^2}{\hbar^2} = l^*(l^*+1). \quad (14.3)$$

С учётом этого, придерживаясь схемы вычислений, которая применялась при описании атома водорода, легко доказать, что выражение (10.12)

$$E_n = -\gamma^2 \frac{m_e Z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (14.5)$$

можно использовать для определения уровней энергии атома щелочного металла, после выполнения в (14.5) замены  $n \rightarrow n - \Delta$ . В результате получим:

$$E_{n,l} = -\gamma^2 \frac{m e^4}{2\hbar^2 (n - \Delta)^2}. \quad (14.5)$$

где величина  $\Delta = l - l^*$ . Она носит название *квантового дефекта*. Разрешая уравнение (14.3) относительно  $l^*$ , находим

$$\Delta = l - l^* = C_1 \gamma \frac{m e^2}{\hbar^2 (l + 1/2)}. \quad (14.6)$$

Результаты, полученные в рамках рассмотренной модели, находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными, которые на этой основе получают простое качественное объяснение. Прежде всего, находит свое объяснение тот факт, что энергия валентного электрона для атомов щелочных металлов (в отличие от атома водорода) зависит не только от главного квантового числа  $n$ , но и от орбитального квантового числа  $l$  (снимается вырождение энергетических уровней электрона по орбитальному квантовому числу  $l$ ). Более того, в экспериментах подтверждается (смотри таблицу 14.1), что значения квантовых дефектов можно (в согласии с формулой (14.6) с хорошей точностью считать зависящими только от числа  $l$  и не зависящими от  $n$ .

Таблица 14.1 – Значения квантовых дефектов

| Элемент   | $\Delta_s$ | $\Delta_p$ | $\Delta_d$ | $\Delta_f$ |
|-----------|------------|------------|------------|------------|
| <i>Li</i> | 0,412      | 0,041      | 0,002      | 0,000      |
| <i>Na</i> | 1,373      | 0,883      | 0,100      | 0,001      |
| <i>K</i>  | 2,230      | 1,776      | 0,146      | 0,007      |

Отметим, что при этом наименьшее из значений  $n - \Delta$  всегда больше единицы; например, для *Na*  $(n - \Delta)_{\min} = 1,63$ , для *Rb*  $(n - \Delta)_{\min} = 1,80$ , а потенциалы ионизации и резонансные потенциалы щелочных металлов значительно меньше, чем у водорода.

В качестве примера рассмотрим схему энергетических уровней атома лития.

Состояния валентного электрона в атоме лития определяют состояния атома в целом. Воспользуемся результатами предыдущей лекции и

определим спектроскопические обозначения возможных состояний этого атома.

Атом лития находится в основном состоянии, когда его валентный электрон заселяет  $2s$ -оболочку. Тогда орбитальное квантовое число атома  $L=l=0$ , спиновое квантовое число атома  $S=s=1/2$ , мультиплетность состояния  $\kappa=2S+1=2$ , квантовое число  $J=j=|l\pm 1/2|=1/2$ , главное квантовое число валентного электрона  $n=2$ , электронная конфигурация  $1s^2 2s^1$ . Спектроскопическое обозначение основного состояния атома лития имеет вид  $1s^2 2s^1 {}^2S_{1/2}$ , или сокращённо  $2s {}^2S_{1/2}$ . Если валентный электрон находится в любом возбуждённом  $ns$ -состоянии ( $n>2$ ), то спектроскопическое обозначение соответствующего состояния атома записывается так:  $ns {}^2S_{1/2}$ . Если валентный электрон находится в  $np$ -оболочке, спектроскопическое обозначение состояний атома имеет вид  $np {}^2P_{1/2, 3/2}$ , если он находится в  $nd$ -оболочке –  $nd {}^2D_{3/2, 5/2}$ , в  $nf$ -оболочке –  $nf {}^2F_{5/2, 7/2}$  и т.д. На рисунке 14.1 спектроскопические обозначения состояний атома указаны в верхней части схемы энергетических уровней. В левой части схемы изображена рассмотренная в лекции 3 схема энергетических уровней атома водорода.

Наличием электронов в  $K$ -слое обусловлено смещение энергетических уровней атома лития (по отношению к уровням водорода с тем же  $n$ ) в сторону меньших энергий; величина этого смещения, как следует из (14.6), уменьшается с ростом  $l$ . Физическая причина этого заключается в следующем. На больших расстояниях от ядра атома эффективное поле совпадает с кулоновским полем заряда  $e$ , так как электроны замкнутых оболочек экранируют поле ядра. На малых расстояниях экранирование является неполным, а вблизи ядра практически отсутствует. Таким

образом, при  $r \rightarrow \infty$   $U(r) \rightarrow -\gamma \frac{e^2}{r}$ , а при  $r \rightarrow 0$   $U(r) \rightarrow -\gamma \frac{Ze^2}{r}$ . Так как для всех расстояний  $r$  кривая  $U(r)$  лежит ниже кривой кулоновского потенциала  $-\frac{e^2}{r}$ , уровень  $E_{nl}$  лежит ниже соответствующего уровня

атома водорода  $E_n = -\frac{R}{n^2}$ . Чем дальше от заполненных оболочек

находится электрон, тем ближе потенциальное поле к полю ядра водородоподобной системы, поэтому при больших  $n, l$  система энергетических уровней атома щелочного металла близка к схеме уровней атома водорода (смотри рисунок 14.1, на котором схема энергетических уровней изображена без соблюдения масштаба).

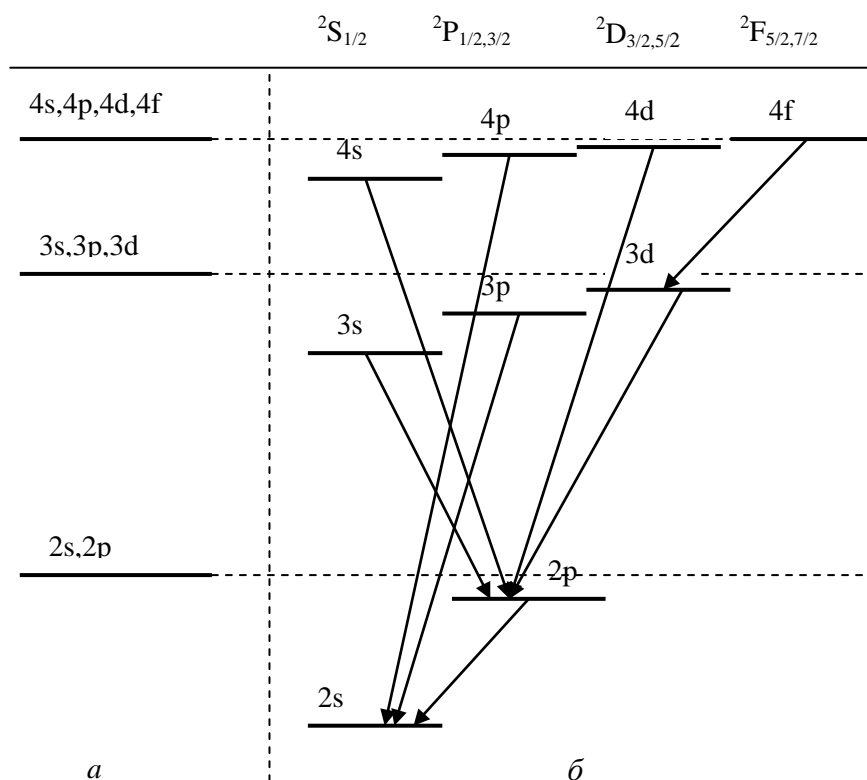


Рисунок 14.1 – Схема термов водорода (а) и лития (б)

В результате экспериментальных исследований спектров щелочных металлов еще в конце XIX века, то есть до создания квантовой механики, установлен ряд эмпирических закономерностей. Наблюдаемая в спектрах испускания атомов щелочных металлов совокупность спектральных линий была разделена на ряд спектральных серий, внешне напоминающих серии водородоподобных атомов: каждая спектральная серия представляла совокупность линий, в пределах которой с ростом частоты излучения линии сгущались, а их интенсивность уменьшалась. Закономерность в расположении спектральных линий, то есть их волновых чисел (частот, длин волн) можно описать, используя комбинационный принцип Ритца

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = T_n - T_k, \quad (14.7)$$

где для атомов щелочных металлов

$$T_n = \frac{R}{(n - \Delta)^2}, \quad (14.8)$$

$R$  – постоянная Ридберга,  $\Delta$  – некоторая поправка, отличающая терм атома щелочного металла от терма атома водорода (то есть квантовый дефект).

В каждой спектральной серии терм  $T_n$  является постоянным, а терм  $T_k$  – пробегает значения  $T_{n+1}$ ,  $T_{n+2}$ , и т.д. Чтобы описать все наблюдаемые спектральные серии в соответствии с (14.7), необходимо воспользоваться

не одной (как для водорода) последовательностью термов, а несколькими, в каждой из которых поправка  $\Delta$  имеет значение, зависящее от  $l$  и практически не зависящее от  $n$  (смотри таблицу 14. 1).

Таблица 14.1 – Значения квантовых дефектов

| Элемент   | $\Delta_s$ | $\Delta_p$ | $\Delta_d$ | $\Delta_f$ |
|-----------|------------|------------|------------|------------|
| <i>Li</i> | 0,412      | 0,041      | 0,002      | 0,000      |
| <i>Na</i> | 1,373      | 0,883      | 0,100      | 0,001      |
| <i>K</i>  | 2,230      | 1,776      | 0,146      | 0,007      |

Последовательное объяснение спектральных закономерностей, наблюдаемых для атомов щелочных металлов, было дано на основе квантовомеханического подхода. Во-первых, были разработаны методы расчета спектра энергий атомов (гораздо более точные, чем изложенные выше) и объяснено расположение энергетических уровней. Во-вторых, были установлены закономерности излучательных переходов, в частности получены правила отбора. Для дипольного излучения они имеют вид:  $\Delta n$  – любое целое число,  $\Delta L = \Delta l = \pm 1$ .

Тем самым получили объяснение эмпирически открытые ранее факты, такие как наличие определенной совокупности переходов при испускании электромагнитного излучения атомом лития:

$2s \leftarrow np$  ( $n = 2, 3, \dots$ ) – главная серия;

$2p \leftarrow ns$  ( $n = 3, 4, \dots$ ) – резкая (вторая побочная) серия;

$2p \leftarrow nd$  ( $n = 3, 4, \dots$ ) – диффузная (первая побочная) серия;

$3d \leftarrow nf$  ( $n = 4, 5, \dots$ ) – серия Бергмана (фундаментальная).

Указанные здесь разрешенные излучательные переходы на рисунке 14.1 изображены стрелками.

Так как  $2s$ -состояние валентного электрона в атоме лития является основным, то главная серия легко наблюдается и в спектре поглощения ( $2s \Rightarrow np$ -переходы). Остальные серии также могут наблюдаться в спектрах поглощения, но только при высокой мощности возбуждающего излучения, когда становится значительной вероятность поглощения возбуждающих квантов электронами, находящимися в возбужденном (например, в  $2p$ ) состоянии, время жизни которого  $\sim 10^{-8}$  с.

Пользуясь схемой энергетических уровней, выражениями (14.5), (14.6) и правилом частот Бора, нетрудно выразить частоту любой спектральной линии атома щелочного металла:

$$\nu = \frac{E_{n'l'} - E_{kl}}{h} = \gamma^2 \frac{me^4}{4\pi\hbar^3} \left[ \frac{1}{(k - \Delta_l)^2} - \frac{1}{(n - \Delta_{l'})^2} \right], \quad (14.9)$$

где соответственно  $n, l'$ ,  $k, l$  – главные и орбитальные квантовые числа исходного и конечного состояний атома,  $\Delta_l$ ,  $\Delta_{l'}$  – квантовые дефекты  $kl$ - и  $nl'$ - уровней.

Если перейти в выражении (14.9) от частоты  $\nu$  к волновому числу  $\tilde{\nu}$ , получим

$$\tilde{\nu} = \frac{R}{(k - \Delta_l)^2} - \frac{R}{(n - \Delta_{l'})^2}. \quad (14.10)$$

Сравнивая (14.10) и (14.7), (14.8), видим, что рассчитанные значения  $\tilde{\nu}$  согласуются с наблюдаемыми в экспериментах. Этот факт рассматривается как подтверждение правильности использованной при теоретическом расчете квантовомеханической модели.

При описании серийных закономерностей в спектрах атомов щелочных металлов используется та же терминология, что и для водородоподобных систем. Так, наиболее длинноволновая линия в заданной спектральной серии называется *головной линией* этой серии; *пределом (границей)* данной серии называется частота (длина волны, волновое число), определяемая из формулы (14.7) при  $k \rightarrow \infty$ . Например, частота головной линии, принадлежащей главной серии спектра испускания атома лития, выражается формулой

$$\nu = \frac{E_{2p} - E_{2s}}{h} = \gamma^2 \frac{me^4}{4\pi\hbar^3} \left[ \frac{1}{(2 - \Delta_s)^2} - \frac{1}{(2 - \Delta_p)^2} \right],$$

где  $\Delta_s$  и  $\Delta_p$  – квантовые дефекты  $2s$ - и  $2p$ -уровней соответственно.

Изложенное описание спектральных закономерностей нетрудно обобщить для атома любого щелочного металла. При этом необходимо только учесть различие электронных конфигураций их основных состояний. Так, например, атом натрия находится в основном состоянии, когда его валентный электрон заселяет  $3s$ -оболочку. Следовательно, построение схемы энергетических уровней для него необходимо начинать с наименьшего по энергии  $3s$ -состояния валентного электрона, что будет соответствовать основному  $3s \ ^2S_{1/2}$ -состоянию атома натрия; основным состоянием атома калия является  $4s \ ^2S_{1/2}$ -состояние и т.д.

С учетом вышесказанного запись спектральных серий для всех атомов щелочных металлов обобщим в таблице 14.2.

Потенциалы ионизации и резонансные потенциалы атомов щелочных металлов невелики. Последние составляют 1,5 – 2 эВ. Поэтому атомы щелочных металлов возбуждаются даже в сравнительно низкотемпературных источниках. Основные спектральные серии расположены в видимой и инфракрасной области спектра. В видимой области спектра находятся и резонансные линии.

Таблица 14.2 – Запись спектральных серий для атомов щелочных металлов

|                       |   |
|-----------------------|---|
| Главная серия         | $ks \leftarrow np, n = k, k + 1, \dots$   |
| Резкая серия          | $kp \leftarrow ns, n = k + 1, k + 2, \dots$   |
| Диффузная серия       | $kp \leftarrow nd, n = k$ (кроме $Li$ ), $k + 1, k + 2, \dots$ ;<br>здесь $k = 2$ для $Li$ , $3$ – для $Na$ , $4$ – для $K$ и т.д.                                      |
| Фундаментальная серия | $kd \leftarrow nf, k = 3$ для $Li, Na, K, k = 4$ – для $Rb$ ,<br>$5$ – для $Cs, 6$ – для $Fr$ ; $n = 4, 5, \dots$ для $Li, Na, K, Rb$ ,<br>$n = 5, 6, \dots$ – для $Fr$ |

В результате анализа спектров щелочных металлов при помощи спектральных приборов с высокой разрешающей способностью обнаружено дублетное расщепление спектральных линий и выявлены следующие эмпирические закономерности<sup>1</sup>:

а) расщепление линий главной серии не является постоянным, а меняется от линии к линии;

б) у линий резкой серии расщепление (в шкале частот) одинаково для всех линий;

в) расщепление всех линий диффузной серии в шкале частот также одинаково.

Наличие расщепления спектральных линий – свидетельство того, что для полной характеристики уровней энергии атомов щелочных металлов недостаточно главного ( $n$ ) и орбитального ( $l$ ) квантовых чисел. Необходимо ввести еще одно квантовое число и установить соответствующее ему взаимодействие, которое обуславливает относительно небольшое изменение энергии атома, ответственное за расщепление линий.

В результате последующих исследований было установлено, что причиной дублетного расщепления спектральных линий является спин-орбитальное взаимодействие, обуславливающее зависимость энергии стационарного состояния ещё и от квантового числа  $j$  (лекция 11). Так как для атомов щелочных металлов, как и для водородоподобных атомов, возможны значения  $j = |l \pm 1/2|$ , то каждый энергетический уровень с заданными значениями  $n$  и  $l$  (кроме  $s$ -уровней, для которых  $j = 1/2$ ) расщепляется на два компонента, которым соответствуют  $j_1 = l + 1/2$  и  $j_2 = l - 1/2$ . Например, энергетические уровни, соответствующие термам

<sup>1</sup> Анализ именно этих экспериментальных фактов натолкнул исследователей (Уленбек, Гаудсмит) на мысль о существовании у электрона в атоме дополнительной степени свободы, называемой спином.



${}^2P_{1/2, 3/2}$ , расщепляются на два компонента  ${}^2P_{1/2}$  и  ${}^2P_{3/2}$ ; уровни, соответствующие термам  ${}^2D_{3/2, 5/2}$ , также расщепляются на два компонента  ${}^2D_{3/2}$  и  ${}^2D_{5/2}$  и т.д. Дополнительная энергия, возникающая при учёте спина электрона и спин-орбитального взаимодействия, может быть определена в рамках релятивистской квантовой механики (смотри лекцию 11). Энергия атома в стационарном состоянии при этом оказывается равной

$$E_{nlj} = E_{nl} + \Delta E_j = -\frac{RchZ_{\text{эф}}^2}{n^2} - \frac{Rch\alpha^2 Z_{\text{эф}}^4}{n^3} \left( \frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right), \quad (14.11)$$

где  $Z_{\text{эф}} = Z - \sigma(n, l)$ , а величины  $\sigma(n, l)$  зависят как от орбитального  $l$ , так и от главного  $n$  квантовых чисел и называются *постоянными экранирования*.

В (14.11) входит также фундаментальная безразмерная постоянная  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ , значение которой выходит далеко за рамки проблемы объяснения спектров щелочных металлов. По историческим причинам она носит название «*постоянная тонкой структуры*».

Образовавшаяся в результате учета спин-орбитального взаимодействия структура энергетических уровней, называемая *тонкой (мультиплетной) структурой*, обуславливает наблюдаемую тонкую структуру спектральных линий. Воспользуемся схемой энергетических уровней лития, приведенной на рисунке 14.2, а также правилами отбора по квантовому числу  $j$  ( $\Delta j = 0, \pm 1$ ) и рассмотрим тонкую структуру линий основных спектральных серий.

Главная серия обусловлена переходами  $2s \leftarrow np$  ( $2s^2 S_{1/2} \leftarrow np^2 P_{1/2, 3/2}$ ). Вследствие спин-орбитального взаимодействия каждый уровень  ${}^2P_{1/2, 3/2}$  расщепляется на два:  ${}^2P_{1/2}$  и  ${}^2P_{3/2}$ . Переходы с каждого из них на уровень  ${}^2S_{1/2}$  разрешены. Таким образом, каждая спектральная линия главной серии расщепляется на два компонента, составляющие дублет (смотри рисунок 14.2а).

Анализируя рисунок 14.2а, видим, что спектральное расщепление (разность частот компонентов дублета) определяется разностью энергий уровней  ${}^2P_{1/2}$  и  ${}^2P_{3/2}$ , которая, как легко увидеть из формулы (14.11), равна

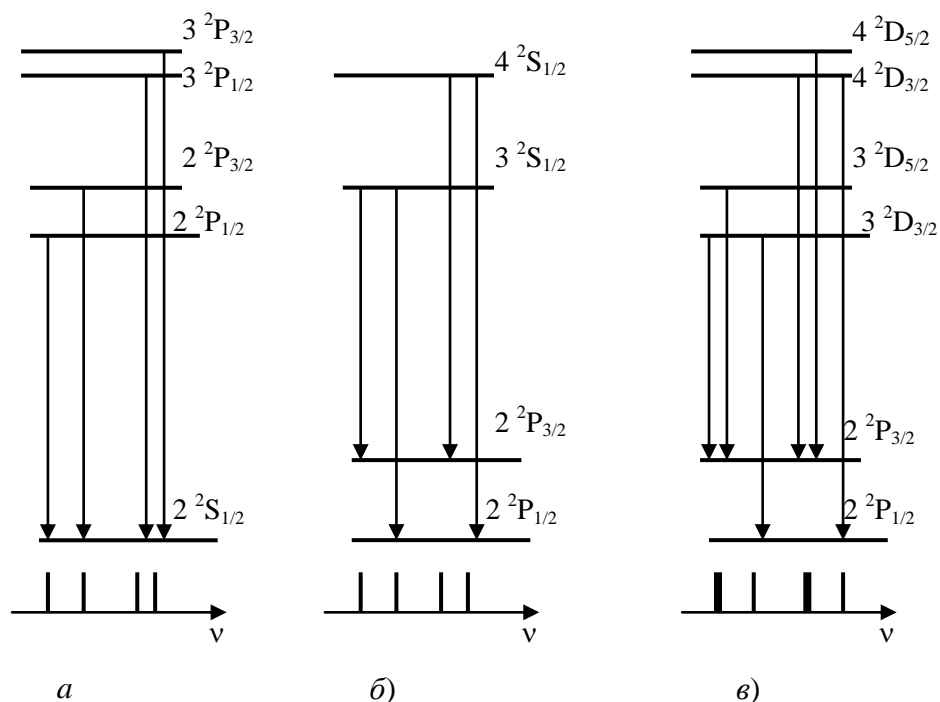
$$\Delta\nu = \frac{1}{h} \left( E_{n^2 P_{3/2}} - E_{n^2 P_{1/2}} \right) = \frac{1}{2} \frac{Rc\alpha^2 Z_{\text{эф}}^4}{n^3}$$

и уменьшается с ростом  $n$ . Этим и объясняется отмеченный выше факт различия величины расщепления  $\Delta\nu$  для различных линий главной серии.

Резкая серия обуславливается переходами  $2p \leftarrow ns$  ( $2p^2P_{1/2, 3/2} \leftarrow ns^2S_{1/2}$ ). Величина расщепления всех спектральных линий этой серии определяется, как видно на рисунке 14.2б, разностью энергий уровней  $2^2P_{3/2}$  и  $2^2P_{1/2}$

$$\Delta\nu = \frac{1}{h} (E_{2^2P_{3/2}} - E_{2^2P_{1/2}}) = \frac{Rc\alpha^2 Z_{эф}^4}{16}$$

и не зависит от главного квантового числа  $n$ . Именно этим фактом объясняется подтверждаемое экспериментально постоянство (в шкале частот) величины расщепления всех спектральных линий резкой серии.



**Рисунок 14.2 – Тонкая структура энергетических уровней и спектральных линий атома лития**

Как видно на рисунке 14.2в, расщепление спектральных линий диффузной серии обусловлено расщеплением как  $D$ -, так и  $P$ -уровней. Правилами отбора по  $j$  разрешены переходы  $2^2P_{1/2} \leftarrow n^2D_{3/2}$ ,  $2^2P_{3/2} \leftarrow n^2D_{3/2}$  и  $2^2P_{3/2} \leftarrow n^2D_{5/2}$ , то есть каждая спектральная линия диффузной серии расщепляется на три компонента. Однако величина расщепления  $D$ -уровней, равная  $E_{n^2D_{5/2}} - E_{n^2D_{3/2}}$ , значительно меньше,

чем величина расщепления  $P$ -уровней <sup>2</sup>. Поэтому спектральные линии, обусловленные переходами  $2^2P_{3/2} \leftarrow n^2D_{3/2}$  и  $2^2P_{3/2} \leftarrow n^2D_{5/2}$ , сливаются в одну размытую (диффузную) линию, так что тонкая структура линий имеет вид дублета. Величина дублетного расщепления определяется выражением

$$\Delta\nu = \frac{1}{h}(E_{2P_{3/2}} - E_{2P_{1/2}}) = \frac{Rc\alpha^2 Z_{\text{эф}}^4}{16},$$

то есть она одинакова для всех линий диффузной серии.

Результаты квантовомеханического расчета величины дублетного расщепления линий в спектрах атомов щелочных металлов <sup>3</sup> (смотри формулу (14.11)) хорошо согласуются с экспериментальными данными, что свидетельствует о правильности используемой теоретической модели.

#### [Задачи по теме лекции 14](#)

Лабораторная работа

[Изучение спектра атома натрия](#)

Видеофрагменты:

[Определение лития по цвету пламени](#)

[Определение натрия по цвету пламени](#)

[Натрий в воде](#)

Презентации:

[Гамильтониан многоэлектронного атома](#)

[Метод Хартри](#)

[Метод Хартри – Фока](#)

---

<sup>2</sup>  $E_{2^2P_{3/2}} - E_{2^2P_{1/2}} \approx 6 \cdot 10^{-5}$  эВ;  $E_{3^2D_{5/2}} - E_{3^2D_{3/2}} \approx 6 \cdot 10^{-6}$  эВ;

$E_{4^2D_{5/2}} - E_{4^2D_{3/2}} \approx 4 \cdot 10^{-6}$  эВ.

<sup>3</sup>  $\tilde{\nu}_2 - \tilde{\nu}_1 \approx 0,34$  см<sup>-1</sup>;  $\tilde{\nu}_4 - \tilde{\nu}_3 \approx 0,10$  см<sup>-1</sup>;  $\tilde{\nu}_6 - \tilde{\nu}_5 = \tilde{\nu}_8 - \tilde{\nu}_7 \approx 0,34$  см<sup>-1</sup>;  
 $\tilde{\nu}_{10} - \tilde{\nu}_9 = \tilde{\nu}_{12} - \tilde{\nu}_{11} \approx 0,34$  см<sup>-1</sup>;  $\nu' - \nu'' \approx 0,03$  см<sup>-1</sup>.