

Часть 4

Спектры многоэлектронных атомов

Многоэлектронными системами называют ионы и атомы, содержащие два и более электронов. Описывающие их уравнения квантовой механики, в отличие от атома водорода, не имеют аналитических решений. Это делает невозможным вычисление точных собственных значений и волновых функций. Соответственно, меняются требования к теоретическим моделям: теперь ставится вопрос о разумном способе *классификации* дискретных состояний. Необходимо подобрать удобные квантовые числа, отвечающие определённым законам сохранения.

В неподвижном атоме, не взаимодействующем с другими системами, сохраняются четыре величины: энергия, чётность, абсолютная величина полного углового момента и одна из его проекций. Их называют *точными интегралами*, и строго говоря, только их квантовые числа имеют физический смысл. Но если мы ограничимся исключительно точными интегралами, то результаты классификации окажутся весьма трудными для восприятия. Во всяком случае, такой выбор параметров совершенно лишён наглядности. Причина заключается в том, что точные интегралы не отражают многие важные процессы внутри атома, например, спин-орбитальное взаимодействие, или поляризацию электронного облака.

В классификации атомных спектров широко применяются *приближённые квантовые числа*, которые соответствуют величинам, не являющимся интегралами движения. В отдельных случаях искажения волновых функций оказываются относительно небольшими, и в первом приближении ими пренебрегают. К таким величинам относятся, например, энергия и орбитальный момент отдельного электрона, суммарный спиновый и орбитальный моменты всех электронов атома, либо электронов атомного остатка. Удачное упрощение задачи делает классификацию уровней более понятной и наглядной. В ней зашифрованы сведения о соотношении разных типов взаимодействия атомных электронов. Более того, детальная информация, заключённая в точных интегралах часто оказывается избыточной, и тогда ограничиваются удобными в работе приближёнными квантовыми числами.