

Множитель $R_{nl}(r)r^2$ определяет радиальное распределение электронной плотности — вероятность найти электрон на определенном расстоянии от ядра, рассчитанную на единицу длины; множитель $|Y_{lm_l}(\theta, \varphi)|^2$ определяет угловое распределение электронной плотности — зависимость $R_{nl}^2(r)r^2$ от r и $|Y_{lm_l}(\theta, \varphi)|^2$ от θ (от φ квадрат модуля сферич. ф-ции не зависит, что приводит для состояния с заданным значением m_l к распределению электронной плотности, обладающему аксиальной симметрией относительно выделенной оси).

Важным свойством состояний водородоподобного А. является независимость его энергии от l и m_l . А. с определенным значением энергии может находиться в неск. состояниях с разл. значениями l и m_l , т. е. имеет место вырождение состояний (вырождение уровней энергии) А., причём число состояний с одинаковой энергией наз. степенью или кратностью вырождения. Независимость энергии А. от m_l (вырождение по m_l) связана со сферич. симметрией А. — энергия А. не зависит от значения проекции орбитального момента на произвольное направление, а независимость энергии от l (вырождение по l) связана с тем, что электрон в атоме движется в кулоновском поле ядра.

Для объяснения нек-рых явлений (напр., тонкой структуры в атомных спектрах) теоретически был введён собств. момент импульса электрона — его спин (см. Дирака уравнение), существование к-рого подтвердилось экспериментально Штерна — Герлаха опытом. Со спином электрона связан спиновый магн. момент электрона. Проекция спинового момента M_{sz} электрона в А. на произвольную ось z определяется магн. спиновым (наз. также просто спиновым) квантовым числом $m_s = \pm 1/2$: $M_{sz} = (h/2\pi) m_s$. Т. о., при заданных l и m_l возможны два разл. состояния А., отличающихся значениями m_s . Полная кратность вырождения по l , m_l и m_s равна $2n^2$.

Для уровней энергии с $n \geq 2$ вырождение снимается вследствие влияния спина на орбитальное движение электрона в А. — спин-орбитального взаимодействия — магн. взаимодействия магн. спинового момента электрона с его орбитальным магн. моментом, возникающим в результате орбитального движения электрона. Снятие вырождения приводит к расщеплению уровней энергии — появлению их тонкой структуры. Состояния А. характеризуются в этом случае полным моментом импульса $M_j = M_l + M_s$. Величина M_j определяется квантовым числом полного момента $j = l \pm 1/2$ (иногда для него употребляют старый термин — внутр. квантовое число). В результате получается $2n - 1$ состояний, отличающихся значениями l и j . При $n = 1, 2, 3$ получаются состояния:

$n=1$	$l=0$	$s = \frac{1}{2}$	$j = \frac{1}{2} \quad 1^2S_{1/2}$
$n=2$	$l=0$	$s = \frac{1}{2}$	$j = \frac{1}{2} \quad 2^2S_{1/2}$
	$l=1$	$s = \frac{1}{2}$	$\left\{ \begin{array}{l} j = \frac{1}{2} \quad 2^2P_{1/2}^0 \\ j = \frac{3}{2} \quad 2^2P_{3/2}^0 \end{array} \right.$
$n=3$	$l=0$	$s = \frac{1}{2}$	$j = \frac{1}{2} \quad 3^2S_{1/2}$
	$l=1$	$s = \frac{1}{2}$	$\left\{ \begin{array}{l} j = \frac{1}{2} \quad 3^2P_{1/2}^0 \\ j = \frac{3}{2} \quad 3^2P_{3/2}^0 \end{array} \right.$
	$l=2$	$s = \frac{1}{2}$	$\left\{ \begin{array}{l} j = \frac{3}{2} \quad 3^2D_{3/2} \\ j = \frac{5}{2} \quad 3^2D_{5/2} \end{array} \right.$

(обозначения в последнем столбце см. в ст. Атомные спектры).

Решение ур-ний квантовой механики с учётом спина электрона (релятивистская квантовая механика) при-

водит к изменению выражения для энергии — к ней добавляется величина

$$\Delta \mathcal{E}_{nj} = -\frac{hcR\alpha^2 Z^4}{n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right),$$

где $\alpha \approx \frac{1}{137}$ — тонкой структуры постоянная. Зависимость $\Delta \mathcal{E}_{nj}$ от j приводит к расщеплению уровня энергии с заданным n на n подуровней. От l поправка $\Delta \mathcal{E}_{nj}$ не зависит, т. е. энергии состояний с одинаковыми j , но разными l должны быть равны. Величина расщепления уровней равна:

$$\delta_{j+1,j} = \Delta \mathcal{E}_{n,j+1} - \Delta \mathcal{E}_{nj} = \frac{hcR\alpha^2 Z^4}{n^3} \cdot \frac{1}{\left(j + \frac{1}{2}\right) \left(j + \frac{3}{2}\right)}.$$

Множитель $\alpha^2 \approx 1/18800$, поэтому расщепление мало; так, для А. водорода при $n=2$ величина $\delta_{j+1,j}$ получается равной $4,5 \cdot 10^{-5}$ эВ. С увеличением Z абсолютная величина расщепления очень быстро растёт (как Z^4 , отсюда величина расщепления $\delta_{j+1,j} \sim Z^4$).

Исследования тонкой структуры спектральных линий и особенно непосредств. измерение расщепления уровней энергии А. водорода и гелия методами радиоспектроскопии с большой точностью подтвердили теоретически полученное выражение для $\delta_{j+1,j}$. Опыт показал, что кроме расщепления наблюдается сдвиг уровней энергии — квантовый эффект, связанный с реакцией излучения. Наиб. точное определение сдвига уровней А. водорода, полученное методами радиоспектроскопии, показало, что расхождение опыта с теорией меньше $0,1\%$.

Наряду с тонкой наблюдается сверхтонкая структура уровней энергии, обусловленная взаимодействием магн. моментов электрона с магн. моментом ядра (см. Ядро атомное), а также изотонич. смещение, связанное с различием масс ядер изотопов одного элемента. Нек-рое искажение сверхтонкой структуры возникает вследствие влияния квадрупольного электрич. момента ядра. Изучение всех этих малых эффектов спектроскопич. методами позволяет определять свойства и структуру атомных ядер. Для атома водорода сверхтонкая структура наблюдается и для основного уровня энергии ($n=1, l=0$; тонкая структура в этом случае отсутствует); это объясняется взаимодействием полного электронного момента атома M_j со спиновым моментом ядра (протона). При переходе между двумя появляющимися подуровнями сверхтонкого расщепления основного уровня водорода возникает излучение с длиной волны $\lambda = 21$ см, наблюдаемое для межзвёздного водорода.

Квантомеханическая теория сложных атомов. Строение и свойства А., содержащих 2 и более электронов, значительно отличаются от теории водородоподобных атомов. Это объясняется прежде всего тем, что возникает необходимость учёта взаимодействий электронов друг с другом: электростатич. отталкивание и магн. взаимодействия спиновых и орбитальных магн. моментов электронов. Электростатич. взаимодействия электронов в А. велики по сравнению с магнитными. Они значительно ослабляют прочность связи электронов с ядром. Так, для А. гелия и гелиепоподобных ионов (Li^+, Be^{2+}, \dots) потенциальная энергия электронов $U(r_1, r_2, r_{12})$:

$$U(r_1, r_2, r_{12}) = -\frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}},$$

где r_1 и r_2 — расстояния 1-го и 2-го электронов от ядра, расстояние r_{12} между электронами определяет энергию их взаимодействия (e^2/r_{12}), играющую весьма существен. роль; напр., энергия связи электронов в He^+ равна $54,40$ эВ, а энергия связи двух электронов в А. гелия в осн. состоянии — $78,98$ эВ, т. е. меньше удвоенной энергии связи одного электрона в He^+ , что объясняется отталкиванием электронов в He .