

Notatki do wykładu VI

Stany atomu wieloelektronowego o określonej energii.

- Konfiguracja elektronowa atomu - zbiór spinorbitali, wykorzystywanych do konstrukcji funkcji falowej dla danego stanu atomu; inaczej: zbiór spinorbitali, którym mogą być przypisywane elektrony w tym stanie atomu.
- Elektrony są nierozróżnialne - nie można określić, który z elektronów jest przypisany któremu spinorbitalowi
- Rozkład gęstości elektronowej i energia zależą od wypadkowego spinu oraz od wypadkowego orbitalnego momentu pędu elektronów.
- Można określić energię atomu oraz liczby kwantowe L , S , M_L i M_S , określające odpowiednio kwadrat całkowitego orbitalnego momentu pędu ($L(L+1)\hbar^2$) i kwadrat całkowitego spinu ($S(S+1)\hbar^2$) elektronów oraz ich rzuty $M_L\hbar$ i $M_S\hbar$

Term - zespół stanów atomu, którym odpowiadałaby taka sama energia, gdyby występowały tylko oddziaływania elektrostatyczne

Symbol termu: ^{2S+1}L

L - liczba kwantowa, określająca kwadrat całkowitego orbitalnego momentu pędu

Oznaczenia literowe zamiast wartości liczbowej L - duże litery S, P, D, F, itd.

dla $L=0, 1, 2, 3$, itd.

S - liczba kwantowa, określająca kwadrat całkowitego spinu; $2S+1$ - multipletowość

$2S+1 = 1$ - singlet

$2S+1 = 2$ - dublet

$2S+1 = 3$ - tryplet

$2S+1 = 4$ - kwartet

$2S+1 = 5$ - kwintet itd.

Stan singletowy, stan trypletowy itd.

np. 3P - tryplet P 4S - kwartet S itp.

M_L - wartości: $-L, -L+1, \dots, 0, \dots, L-1, L$

M_S - wartości: $-S, -S+1, \dots, S-1, S$

Energia nie zależy od M_L ani od M_S , tylko od L i S .

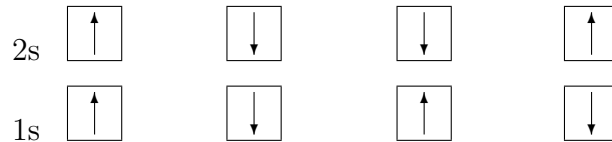
Krotność degeneracji (liczba stanów) termu: $(2S+1)(2L+1)$

Sposoby znajdowania termów, odpowiadających konfiguracji atomu (określonej ogólnie przez podanie liczb elektronów, przyporządkowanych każdej podpowłoce):

- znalezienie wartości M_L i M_S dla wszystkich szczegółowych konfiguracji (różniących się liczbami m i m_s dla poszczególnych elektronów) i zidentyfikowanie, jakim wartościom L i S odpowiadają
- dodawanie wektorów orbitalnych momentów pędu i spinów elektronów (TYLKO dla tzw. elektronów nierównoważnych, tzn. opisywanych przez różne orbitale)

Konfiguracja atomu helu: $1s^1 2s^1$

Konfiguracje szczegółowe:



$(m_1, m_{s1}; m_2, m_{s2})$	$(0, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2})$	$(0, -\frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2})$	$(0, \frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2})$	$(0, -\frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2})$
M_L	0	0	0	0
M_S	1	-1	0	0

$M_S: -1, 0, 1 \Rightarrow S = 1$ ($2S+1 = 3$); $M_L = 0 \Rightarrow L = 0 \Rightarrow {}^3S$

$M_S = 0 \Rightarrow S = 0$ ($2S+1 = 1$); $M_L = 0 \Rightarrow L = 0 \Rightarrow {}^1S$

Dodawanie momentów pędu w mechanice kwantowej

W mechanice kwantowej nie można dodawać momentów pędu tak, jak w mechanice klasycznej, ponieważ znany jest tylko kwadrat momentu pędu (długość wektora momentu pędu) i JEDEN z jego rzutów (na oś z).

Jeśli moment pędu, którego kwadrat (długość) określony jest przez liczbę kwantową j , został otrzymany w wyniku dodania dwóch momentów pędu, których kwadraty (długości) określone są przez liczby kwantowe j_1 i j_2 , to możliwymi wartościami j są:

$$j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, \dots, |j_1 - j_2|$$

(wszystkie, różniące się o 1, wartości zawarte między $|j_1 - j_2|$ a $j_1 + j_2$)

(Jest to tzw. wzór Clebscha-Gordana)

Przykłady:

Jeśli poboczne liczby kwantowe dla dwóch elektronów wynoszą: $l_1=3$ i $l_2=1$, to liczba kwantowa, określająca kwadrat całkowitego orbitalnego momentu pędu, L może przyjmować wartości: 2, 3, 4

Spinowe liczby kwantowe: $s_1 = \frac{1}{2}$, $s_2 = \frac{1}{2}$, liczba kwantowa, określająca kwadrat całkowitego spinu dwóch elektronów, S może przyjmować wartości: 0, 1.

Konfiguracja atomu helu: $1s^1 2s^1$ (konfiguracja elektronów nierównoważnych: ss).

Dodawanie momentów pędu:

$$l_1 = 0, \quad l_2 = 0, \quad s_1 = \frac{1}{2}, \quad s_2 = \frac{1}{2}$$

$$|0 - 0| \leq L \leq 0 + 0 \Rightarrow L = 0 \quad \Rightarrow \text{term S}$$

$$|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}| \leq S \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{2}, \text{ czyli } 0 \leq S \leq 1$$

Możliwe mutlipletowości: $2 \cdot 0 + 1 = 1$ i $2 \cdot 1 + 1 = 3$

Termy: 1S - singlet S i 3S - tryplet S

Term 1S - krotność degeneracji $(2 \cdot 0 + 1)(2 \cdot 0 + 1) = 1$

Term 3S - krotność degeneracji $(2 \cdot 1 + 1)(2 \cdot 0 + 1) = 3$

Suma krotności degeneracji termów, odpowiadających danej konfiguracji ogólnej, równa jest liczbie konfiguracji szczegółowych (w przypadku opisanym powyżej: $1 + 3 = 4$).

Konfiguracja elektronów równoważnych: s^2

${}_2\text{He}$: $1s^2$ - konfiguracja stanu podstawowego

Tylko jeden wyznacznik Slatera (jedna konfiguracja szczegółowa).



$$M_L = 0 + 0 = 0; \quad M_S = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 \implies L = 0, \quad S = 0; \quad 2S + 1 = 1$$

Term: 1S

Dla **każdej** zamkniętej podpowłoki: $M_L = 0$ i $M_S = 0$.

Na przykład, np^6 :

$$M_L = 2 \cdot (-1) + 2 \cdot 0 + 2 \cdot 1 = 0;$$

$$M_S = 3 \cdot \frac{1}{2} + 3 \cdot (-\frac{1}{2}) = 0;$$

Konfiguracji, dla której wszystkie podpowłoki są zamknięte, odpowiada term 1S .

Konfiguracja stanu podstawowego atomu sodu ${}_{11}\text{Na}$: ${}_{10}\text{Ne} 3s^1$

$$L = l_1 = 0, \quad S = s_1 = \frac{1}{2}, \quad 2S + 1 = 2 \quad \Rightarrow \text{term: } ^2S$$

2 konfiguracje szczegółowe i krotność degeneracji termu 2.

Konfiguracja sp, np. dla stanu wzbudzonego atomu magnezu, ${}_{12}\text{Mg}:[{}_{10}\text{Ne}]3s^13p^1$.

Podpowłoka ns: 2 spinorbitale; podpowłoka np: 6 spinorbitali

$\Rightarrow 2 \cdot 6 = 12$ konfiguracji szczegółowych

Dodawanie momentów pędu:

$$l_1 = 0, l_2 = 1 \Rightarrow |1 - 0| \leq L \leq 1 + 0 \Rightarrow L = 1 \Rightarrow \text{term P}$$

$$s_1 = \frac{1}{2}, s_2 = \frac{1}{2} \Rightarrow \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right| \leq S \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \Rightarrow S : 0, 1$$

$$2S+1: 1, 3 \implies \text{Termy: } {}^1\text{P i } {}^3\text{P}$$

$${}^1\text{P- krotność degeneracji: } (2 \cdot 0 + 1)(2 \cdot 1 + 1) = 1 \cdot 3 = 3;$$

$${}^3\text{P- krotność degeneracji: } (2 \cdot 1 + 1)(2 \cdot 1 + 1) = 3 \cdot 3 = 9$$

$$3 + 9 = 12$$

Konfiguracja pp (6·6 = 36 szczegółowych konfiguracji)

np. dla stanu wzbudzonego atomu węgla, ${}_{6}\text{C}:1s^22s^22p^13p^1$

$$l_1=1, l_2=1, |1 - 1| \leq L \leq 1 + 1 \Rightarrow L: 0, 1, 2 \Rightarrow \text{Termy: S, P, D}$$

$$s_1=\frac{1}{2}, s_2=\frac{1}{2}; \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right| \leq S \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \Rightarrow S: 0, 1; 2S+1: 1, 3$$

$$\text{Termy: } {}^3\text{D}, {}^1\text{D}, {}^3\text{P}, {}^1\text{P}, {}^3\text{S}, {}^1\text{S}$$

$$\text{Krotność degeneracji termów: } 3 \cdot 5 + 1 \cdot 5 + 3 \cdot 3 + 1 \cdot 3 + 3 \cdot 1 + 1 \cdot 1$$

$$= 15 + 5 + 9 + 3 + 3 + 1 = 36$$

Dla elektronów równoważnych nie wszystkie kombinacje L i S są dozwolone ze względu na zakaz Pauliego. Nie wszystkie termy, występujące dla konfiguracji pp są dozwolone dla konfiguracji p^2 .

Konfiguracja p^2 , np. dla stanu podstawowego atomu węgla, ${}_{6}\text{C}:1s^22s^22p^2$.

Termy dla konfiguracji np^2 (np. $2p^2$).

W tabeli wszystkie możliwe (zgodne z zakazem Pauliego) sposoby przyporządkowania dwóch elektronów 6-ciu spinorbitalom (3 orbitale p i 2 funkcje spinowe). $\binom{6}{2} = 15$ sposobów. W nawiasach podano wartości magnetycznej liczby kwantowej i magnetycznej spinowej liczby kwantowej dla każdego elektronu ($m_1, m_{s1}; m_2, m_{s2}$). M_S - wartość liczby kwantowej rzutu całkowitego spinu na wyróżniony kierunek w przestrzeni; M_L - wartość liczby kwantowej rzutu całkowitego orbitalnego momentu pędu na wyróżniony kierunek w przestrzeni.

		M_S			
		+1	0	-1	
	+2	$(+1 + \frac{1}{2}; +1 - \frac{1}{2})$			
	+1	$(+1 + \frac{1}{2}; 0 + \frac{1}{2})$	$(+1 + \frac{1}{2}; 0 - \frac{1}{2})$	$(+1 - \frac{1}{2}; 0 + \frac{1}{2})$	$(+1 - \frac{1}{2}; 0 - \frac{1}{2})$
M_L	0	$(+1 + \frac{1}{2}; -1 + \frac{1}{2})$	$(+1 + \frac{1}{2}; -1 - \frac{1}{2})$	$(+1 - \frac{1}{2}; -1 + \frac{1}{2})$	$(+1 - \frac{1}{2}; -1 - \frac{1}{2})$
	-1	$(-1 + \frac{1}{2}; 0 + \frac{1}{2})$	$(-1 + \frac{1}{2}; 0 - \frac{1}{2})$	$(-1 - \frac{1}{2}; 0 + \frac{1}{2})$	$(-1 - \frac{1}{2}; 0 - \frac{1}{2})$
	-2	$(-1 + \frac{1}{2}; -1 - \frac{1}{2})$			

Identyfikujemy przyporządkowania elektronów odpowiadające $L=2$ (bo jest $M_L=2$), a więc $L = 2$ i $M_L=2, 1, 0, -1, -2$; $M_S=0$ (usuwamy 5 możliwości pasujących do termu 1D).

		M_S		
		+1	0	-1
	+2			
	+1	$(+1 + \frac{1}{2}; 0 + \frac{1}{2})$	$(+1 - \frac{1}{2}; 0 + \frac{1}{2})$	$(+1 - \frac{1}{2}; 0 - \frac{1}{2})$
M_L	0	$(+1 + \frac{1}{2}; -1 + \frac{1}{2})$	$(+1 - \frac{1}{2}; -1 + \frac{1}{2})$	$(+1 - \frac{1}{2}; -1 - \frac{1}{2})$
	-1	$(-1 + \frac{1}{2}; 0 + \frac{1}{2})$	$(-1 - \frac{1}{2}; 0 + \frac{1}{2})$	$(-1 - \frac{1}{2}; 0 - \frac{1}{2})$
	-2			

Identyfikujemy i usuwamy 9 możliwych przyporządkowań, pasujących do termu 3P , czyli takich konfiguracji szczegółowych, dla których M_L przyjmuje jedną z wartości -1, 0, 1, a M_S też jedną z wartości -1, 0, 1.

		M_S		
		+1	0	-1
	+2			
	+1			
M_L	0	$(0 + \frac{1}{2}; 0 - \frac{1}{2})$		
	-1			
	-2			

Pozostaje tylko jedna możliwość ($M_L=0$ i $M_S=0$), odpowiadająca termowi 1S

Konfiguracja dd, np. $3d^14d^1$ (stan wzbudzony atomu tytanu) ${}_{22}\text{Ti}:[{}_{18}\text{Ar}]3d^14s^24d^1$

$10 \cdot 10 = 100$ konfiguracji szczegółowych

$l_1=2, l_2=2 \Rightarrow 0 \leq L \leq 4 \Rightarrow L: 0, 1, 2, 3, 4 \Rightarrow$ Termy: S, P, D, F, G

$s_1 = \frac{1}{2}, s_2 = \frac{1}{2} \Rightarrow 0 \leq S \leq 1 \Rightarrow S: 0, 1 \Rightarrow 2S+1: 1, 3$

\Rightarrow Termy: ${}^3\text{G}, {}^1\text{G}, {}^3\text{F}, {}^1\text{F}, {}^3\text{D}, {}^1\text{D}, {}^3\text{P}, {}^1\text{P}, {}^3\text{S}, {}^1\text{S}$

Krotność degeneracji: $3 \cdot 9 + 1 \cdot 9 + 3 \cdot 7 + 1 \cdot 7 + 3 \cdot 5 + 1 \cdot 5 + 3 \cdot 3 + 1 \cdot 3 + 3 \cdot 1 + 1 \cdot 1 =$
 $= 27 + 9 + 21 + 7 + 15 + 5 + 9 + 3 + 3 + 1 = 100$

Konfiguracja d^2 , np. ${}_{22}\text{Ti}:[{}_{18}\text{Ar}]3d^24s^2$

$\binom{10}{2} = 45$ szczegółowych konfiguracji

Przez analogię, porównując różnice między termami dla konfiguracji pp a p^2

\Rightarrow Termy: ${}^1\text{G}, {}^3\text{F}, {}^1\text{D}, {}^3\text{P}, {}^1\text{S}$

Krotność degeneracji: $1 \cdot 9 + 3 \cdot 7 + 1 \cdot 5 + 3 \cdot 3 + 1 \cdot 1 = 9 + 21 + 5 + 9 + 1 = 45$

Podobnie:

$ff - {}^3\text{I}, {}^1\text{I}, {}^3\text{H}, {}^1\text{H}, {}^3\text{G}, {}^1\text{G}, {}^3\text{F}, {}^1\text{F}, {}^3\text{D}, {}^1\text{D}, {}^3\text{P}, {}^1\text{P}, {}^3\text{S}, {}^1\text{S}$

$f^2 : {}^1\text{I}, {}^3\text{H}, {}^1\text{G}, {}^3\text{F}, {}^1\text{D}, {}^3\text{P}, {}^1\text{S}$

Konfiguracje elektronów równoważnych

$p^3: \binom{6}{3} = \frac{6!}{3!3!} = 20$ konfiguracji szczegółowych

Termy: ${}^2\text{D}, {}^2\text{P}, {}^4\text{S}$ ($2 \cdot 5 + 2 \cdot 3 + 4 \cdot 1 = 20$)

(W. Kołos, J.Sadlej, *Atom i cząsteczka*, WNT 2007, s. 117)

$d^4: \binom{10}{4} = \frac{10!}{4!6!} = 210$ konfiguracji szczegółowych

$f^7: \binom{14}{7} = \frac{14!}{7!7!} = 3432$ konfiguracje szczegółowe

Można wykazać, że dla konfiguracji p^{6-n} otrzymuje się takie same termy jak dla p^n (np. dla p^4 jak dla p^2), dla d^{10-n} takie same termy jak dla d^n , dla f^{14-n} jak dla f^n .

W rzeczywistości - nie tylko oddziaływania elektrostatyczne.

Moment magnetyczny związany ze spinem elektronu.

Moment magnetyczny związany z orbitalnym momentem pędu elektronu.

Oddziaływanie momentów magnetycznych: spinowego i orbitalnego - sprzężenie spinowo-orbitalne.

Wielkość sprzężenia spinowo-orbitalnego zależy od względnej orientacji momentów magnetycznych spinowego i orbitalnego, czyli od względnej orientacji tych dwóch momentów pędu

Ustawienie równoległe orbitalnego momentu pędu i spinu elektronu - niekorzystne (duża energia)

Ustawienie antyrównoległe orbitalnego momentu pędu i spinu elektronu - korzystne (mała energia)

Dla lżejszych atomów różnice energii, wynikające z oddziaływania momentów magnetycznych są znacznie mniejsze niż różnice energii, wynikające z różnic w rozkładzie gęstości elektronowej.

Sprzężenie spinowo-orbitalne - zależność energii od całkowitego momentu pędu \vec{J} (sumy całkowitego orbitalnego momentu pędu, \vec{L} i całkowitego spinu, \vec{S})

Sprzężenie L - S , Russella-Saundersa, dla lżejszych atomów.

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Liczba kwantowa J , określa kwadrat całkowitego momentu pędu: $\langle \hat{J}^2 \rangle = J(J+1)\hbar^2$.

Zgodnie ze wzorem Clebscha-Gordana:

$$|L - S| \leq J \leq L + S$$

Poziomy energetyczne termu:

$${}^{2S+1}L_J$$

Termowi odpowiada

jeśli $S < L \Rightarrow (2S+1)$ poziomów energetycznych

jeśli $L < S \Rightarrow (2L+1)$ poziomów energetycznych

Przykłady:

Term: ${}^3D \Rightarrow |2 - 1| \leq J \leq 2+1 \Rightarrow$ Poziomy: ${}^3D_1, {}^3D_2, {}^3D_3$

Term: ${}^2P \Rightarrow |1 - \frac{1}{2}| \leq J \leq 1 + \frac{1}{2} \Rightarrow$ Poziomy: ${}^2P_{\frac{1}{2}}, {}^2P_{\frac{3}{2}}$

Dla stanu układu wieloelektronowego określona jest liczba M_J , czyli rzut całkowitego momentu pędu na wyróżniony kierunek w przestrzeni (na oś z).

Energia nie zależy od wartości M_J , tylko od wartości J .

Dla danego J , M_J przyjmuje wartości: $-J, (-J+1), \dots, (J-1), J$, czyli jest $2J+1$ możliwych wartości M_J . (Dla połówkowej wartości J wśród wartości M_J nie ma 0).

Krotność degeneracji poziomu $^{2S+1}L_J$ wynosi $(2J + 1)$.

Jest $2J + 1$ stanów o takiej samej energii, różniących się wartościami rzutu całkowitego momentu pędu na wyróżniony kierunek w przestrzeni.

Suma krotności degeneracji poziomów energetycznych, odpowiadających danemu termowi, równa jest krotności degeneracji tego termu.

Przykłady:

Dla termu 3D o krotności degeneracji: $(2 \cdot 1 + 1)(2 \cdot 2 + 1) = 15$

Poziomy energetyczne: 3D_1 , krotność degeneracji: $2 \cdot 1 + 1 = 3$

3D_2 , krotność degeneracji: $2 \cdot 2 + 1 = 5$

3D_3 , krotność degeneracji: $2 \cdot 3 + 1 = 7$

$$3 + 5 + 7 = 15$$

Dla termu 2P o krotności degeneracji: $(2 \cdot \frac{1}{2} + 1)(2 \cdot 1 + 1) = 6$

Poziomy energetyczne: $^2P_{\frac{1}{2}}$, krotność degeneracji: $2 \cdot \frac{1}{2} + 1 = 2$

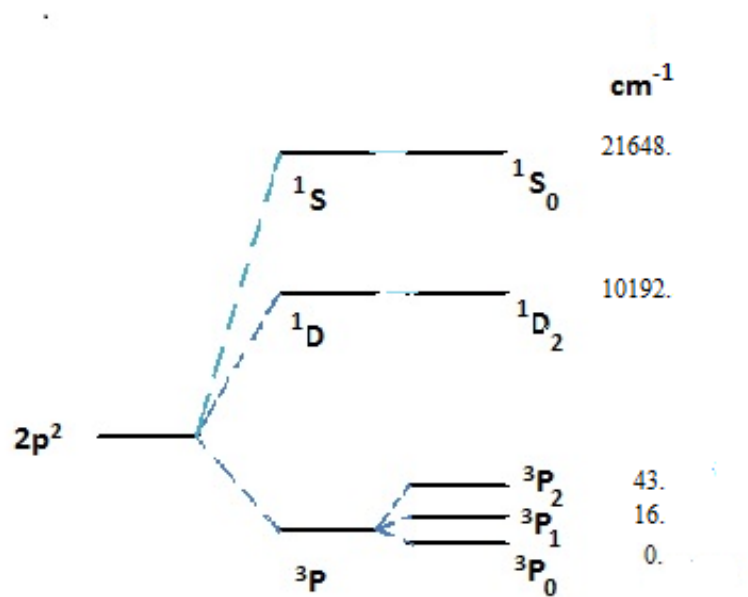
$^2P_{\frac{3}{2}}$, krotność degeneracji: $2 \cdot \frac{3}{2} + 1 = 4$

$$2 + 4 = 6$$

Reguły Hunda

- Termem podstawowym (o najniższej energii) dla danej konfiguracji jest term o największej multipletowości
- Spośród termów o największej multipletowości dla danej konfiguracji, termem o najniższej energii jest term o największej wartości L
- Dla podpowłoki zapełnionej mniej niż w połowie - poziomem o najniższej energii jest poziom o najmniejszej wartości J ; dla podpowłoki zapełnionej więcej niż w połowie - poziomem o najniższej energii jest poziom o największej wartości J

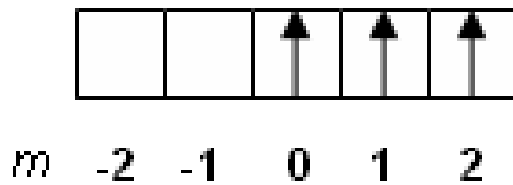
Dla atomu węgla: $1s^2 2s^2 2p^2$



Wyznaczenie tylko termu podstawowego dla elektronów równoważnych.

Przykład: konfiguracja d^3

Rozmieszczenie elektronów tak, aby uzyskać największą możliwą wartość M_S (S) i M_L (L) (reguły Hunda)

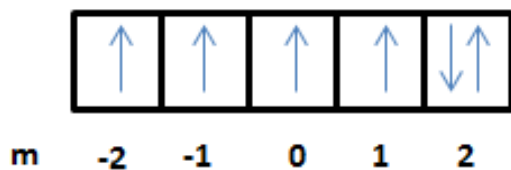


$M_L = 2 + 1 + 0 = 3, \Rightarrow L = 3; M_S = \frac{3}{2}, \Rightarrow S = \frac{3}{2}, 2S + 1 = 4 \Rightarrow$ term 4F ;

możliwe wartości J : od $3 - \frac{3}{2}$ do $3 + \frac{3}{2}$, czyli $\frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}$

Podpowłoka zapełniona mniej niż w połowie \Rightarrow podstawowy poziom energetyczny: ${}^4F_{\frac{3}{2}}$

Przykład: konfiguracja d^6



$$M_L = 2 \cdot 2 + 1 + 0 + (-1) + (-2) = 2 \Rightarrow L = 2$$

$$M_S = 5 \cdot \frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) = 2, \Rightarrow S = 2; 2S + 1 = 5$$

$$\Rightarrow \text{term } {}^5D$$

Możliwe wartości J : od $|2 - 2|$ do $2 + 2$, czyli 0, 1, 2, 3, 4

Podpowłoka zapełniona więcej niż w połowie \Rightarrow podstawowy poziom energetyczny: 5D_4

Ilustracje: poziomy energetyczne dla helu:

(<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/quantum/imgqua/heliumlev.gif>)

struktura subtelna widma (linie D dla atomu sodu) :

(<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/Hbase/quantum/sodium.html>)

Atom w zewnętrznym polu magnetycznym Efekt Zeemana

Moment magnetyczny μ_z^l wygenerowany przez orbitalny moment pędu.
Oś z zgodna z kierunkiem pola magnetycznego B .

$$\mu_z^l = \frac{-e\hbar}{2m_e} m = \gamma_e m \hbar = -\mu_B m \quad (1)$$

m - magnetyczna liczba kwantowa

$\gamma_e = \frac{-e}{2m_e}$ - stała magnetogiryczna elektronu

$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,273 \cdot 10^{-24} \text{ J/T}$ - magneton Bohra

($1\text{T} = 1\text{kg} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{A}^{-1}$)

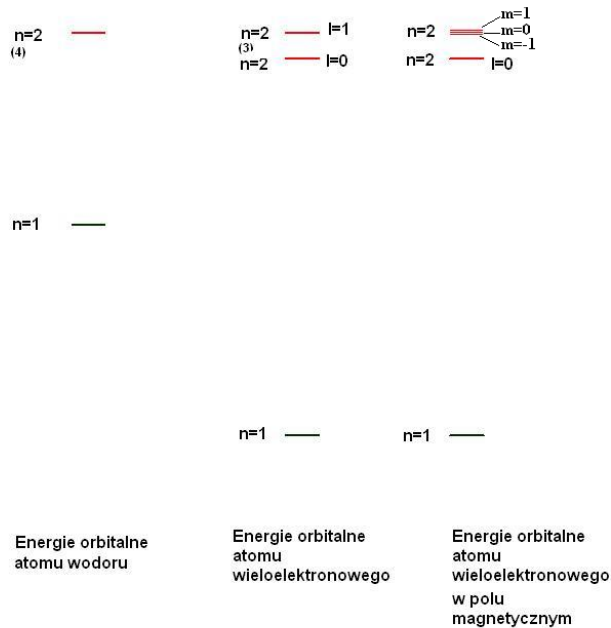
Energia momentu magnetycznego w polu magnetycznym o kierunku z

$$E = -\mu_z B \quad (2)$$

B - indukcja magnetyczna

$$\Delta E_m = -\mu_z^l B = \mu_B m B \quad (3)$$

Np. $l=1$, $\Delta E_1 = +\mu_B B$, $\Delta E_0 = 0$, $\Delta E_{-1} = -\mu_B B$



Dla kilku elektronów - energia zależy od liczby kwantowej M_L .

Moment magnetyczny μ_z^s wygenerowany przez spin elektronu

$$\mu_z^s = -g_e \mu_B m_s = -2,0023 \mu_B m_s \quad (4)$$

m_s - magnetyczna spinowa liczba kwantowa

g_e - wartość g elektronu

W zewnętrznym polu magnetycznym dla elektronu, którego stan określony jest przez liczbę kwantową m_s :

$$\Delta E_{m_s} = -\mu_z^s B = g_e m_s \mu_B B \quad (5)$$

$$\mu_B = 9,273 \cdot 10^{-24} \text{ J/T} = 0,467 \text{ cm}^{-1} \text{ T}^{-1} = 5,79 \cdot 10^{-5} \text{ eV/T}$$

$$(1 \text{ eV} = 8065,47 \text{ cm}^{-1})$$

Energia atomu w słabym polu magnetycznym zależy od liczby kwantowej M_J (określającej rzut całkowitego momentu pędu elektronów na kierunek pola magnetycznego z).

Np. poziom energetyczny 1P_1 rozszczepi się w polu magnetycznym na 3 poziomy, odpowiadające liczbom M_J : -1, 0, 1.

Przykłady: efekt Zeemana normalny (Atkins, *Chemia fizyczna*, PWN 2001, str. 363), efekt Zeemana anomalny dla linii D sodu.