

התבונן לעבר דברנו על אינטראקציות ספין-וסיליה באטום המימן.
כעת נדבר על אטומים מרובים יותר:

$$H = H_{cf} + H_{res} + H_{so}$$

H_{cf} - central field hamiltonian $[H_{cf} = \sum_{i=1}^N (-\frac{1}{2} \nabla_{r_i}^2 - \frac{Z}{r_i} + S(r_i))]$

H_{res} - residual Coulomb hamiltonian $[H_{res} = \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} - \sum_{i=1}^N S(r_i)]$

H_{so} - spin-orbit hamiltonian

$$H_{so} = \sum_{i=1}^N \xi(r_i) \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i$$

ניתן לראות כי עבור קוליות מעלות אינטראקציות ספין וסיליה תהיה אפס, וצד משום שלכל אלקטרון עם ספין \uparrow יהיה אלקטרון נוסף עם ספין \downarrow , כך שהסכום יתאפס.
מכאן אנו רואים כי אין צורך בהיפרון כגם בקוליות המעלות.

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

$$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i$$

$$\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i$$

האם זה גורם נכון?

ככף, $H_{CF} \gg H_{res}$ ואם $H_{CF} \gg H_{SO}$

אהם בעמנוטו של אפסרויות:

(א) $H_{res} > H_{SO}$

המקרה זה האנטראקציה בין האלקטרונים חזקה יותר מאנטראקציה ספין-מסילה, ולכן יהיה נכון לחבר קודם את כף \vec{L}, \vec{S} למקרה זה לקרא LS -coupling והוא תקף עבור האטומים (בהיותו הקלים)

(ב) $H_{SO} > H_{res}$

המקרה זה, האנטראקציה הדואלית בין האלקטרונים היא דווקא ספין-מסילה המקרה זה, כהר לא נכף קודם כל לצמד את \vec{L}, \vec{S} , ולכן יוצר: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ ועלתי נכון:

$$\vec{J} = \sum_i \vec{J}_i$$

מזה שה לקרא : jj -coupling

קירוב זה תקף בעיקר האטומים כבדים ($Z \gg 1$)

$$H_{SO} \propto Z^4$$

ואם משום ש

$$H_{res} \propto Z$$

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

$$j_1 = \frac{1}{2}, \quad \Downarrow \quad j_2 = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$$

$$\Downarrow$$

$$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \text{ or } \left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \Rightarrow J = 1, 0 \Rightarrow \left\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}_1, \left\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}_0$$

$$\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \Rightarrow J = 2, 1 \Rightarrow \left\{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\}_2, \left\{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\}_1$$

