

Государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования Московской области
«Международный университет природы, общества и человека «Дубна»
(Университет «Дубна»)
Факультет естественных и инженерных наук
Кафедра Ядерной физики

Специальный семинар по физике ядра и ядерным реакциям

В.В.Самарин

Атом и центральное поле

Вопросы 5, 6, 7.

Вопрос 5. Атом водорода.

- Движение в центральном поле.
- Атом водорода: волновые функции и уровни энергии

Движение в центральном поле

Решение уравнения Шредингера

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + k \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0. \quad \Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) \psi = 0$$

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Здесь r, θ, φ – сферические координаты, l – орбитальное квантовое число
 $m = m_l$ – магнитное орбитальное квантовое число,

$$m = m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l.$$

Функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ называются сферическими гармониками (или сферическими функциями), в случае $m = m_l = 0$ они выражаются через так называемые многочлены (полиномы) Лежандра

$$Y_{l0}(\theta) = C_l P_l(\cos \theta).$$

Радialные части $R_{nl}(r)$ находятся путем решения радиального уравнения Шредингера.

Собственные значения операторов квадрата и проекции момента импульса, квадрата орбитального момента и проекции орбитального момента

$$\hat{M}^2 Y_{lm} = \hbar^2 \hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}; \quad \hat{M}_z Y_{lm} = \hbar \hat{L}_z = \hbar m_l Y_{lm}$$

Атом водорода: уровни энергии и спектр излучения

$$E_n = -\frac{hcR_H}{n^2} \text{ или } E_n \approx -\frac{13.6}{n^2} \text{ эВ.}$$

Решение уравнения Шредингера

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + k \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0. \quad (5.13)$$

дает для состояний электрона в атоме водорода те же энергии (5.3), (5.6), что и модель Бора, Формула Бальмера для длин волн в видимой и ближней ультрафиолетовой части спектра

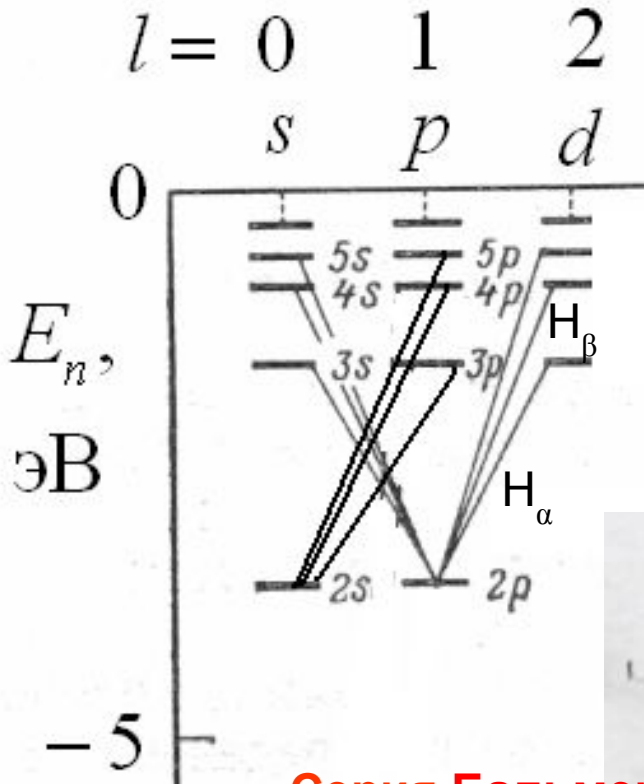
$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad n_2 = n_1 + 1, n_1 + 2, \dots$$

постоянная Ридберга

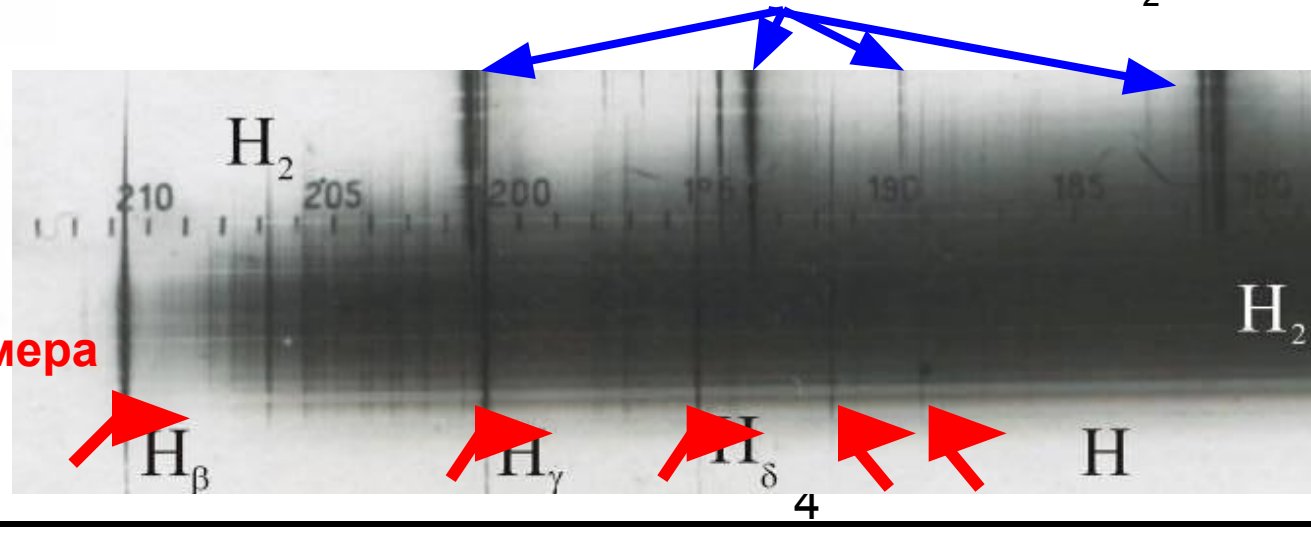
приведенная масса электрона и протона

$$R_H = \frac{\mu e^4}{8ch^3 \epsilon_0^2}$$

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} = \frac{m_e}{1 + m_e/m_p} \approx m_e$$



Спектры излучения атомов **H**, **Hg** и молекулы **H₂**



Серия Бальмера

λ

Атом водорода: спектральные серии, уровни энергии и волновые функции

$$E(n) = -\frac{1}{n^2} \frac{e^2}{2a_A}; \quad a_A = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

или $E_n \approx -\frac{13.6}{n^2}$ эВ.

$l = 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad \dots$
 $s \quad p \quad d \quad f \quad \dots$



Решение уравнения Шредингера

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + k \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0. \quad (5.13)$$

дает для состояний электрона в атоме водорода те же энергии (5.3), (5.6), что и модель Бора, и волновые функции $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$, называемые атомными орбиталями (АО)

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (5.14)$$

Здесь r, θ, φ – сферические координаты, $m = m_l$ – магнитное орбитальное квантовое число,

$$m = m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l. \quad (5.15)$$

Функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ называются сферическими гармониками (или сферическими функциями), в случае $m = m_l = 0$ они выражаются через так называемые многочлены (полиномы) Лежандра

$$Y_{l0}(\theta) = C_l P_l(\cos \theta). \quad (5.16)$$

Радиальные части $R_{nl}(r)$ находятся путем решения радиального уравнения Шредингера. Для атома водорода они имеют следующие свойства:

$$R_{nl}(r) = C_n r^{n-1} \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right), \quad l = n-1, \quad (5.17)$$

$$R_{nl}(r) \rightarrow C_n r^{n-1} \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right), \quad r \rightarrow \infty, \quad 0 \leq l \leq n-1. \quad (5.18)$$

У состояний с максимальным $l = n-1$, которым соответствуют круговые боровские орбиты, радиальная плотность вероятности обнаружения электрона на расстоянии r от ядра

$$p(r) = r^2 R_{nl}^2(r), \quad (5.19)$$

максимальна на расстоянии от ядра

$$r_n = a_0 n^2, \quad (5.20)$$

равном радиусу соответствующей орбиты (5.5).

Сферические гармоники и полиномы Лежандра: пример расчета в Maple

Функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ называются сферическими гармониками (или сферическими функциями), в случае $m = m_l = 0$ они выражаются через так называемые многочлены (полиномы) Лежандра

$$Y_{l0}(\theta) = C_l P_l(\cos \theta). \quad (5.16)$$

В программе Maple есть возможность получать явный вид полиномов Лежандра и строить угловые диаграммы для плотности вероятности $|Y_{l0}(\theta)|^2$ (см. рис. Пб.2).

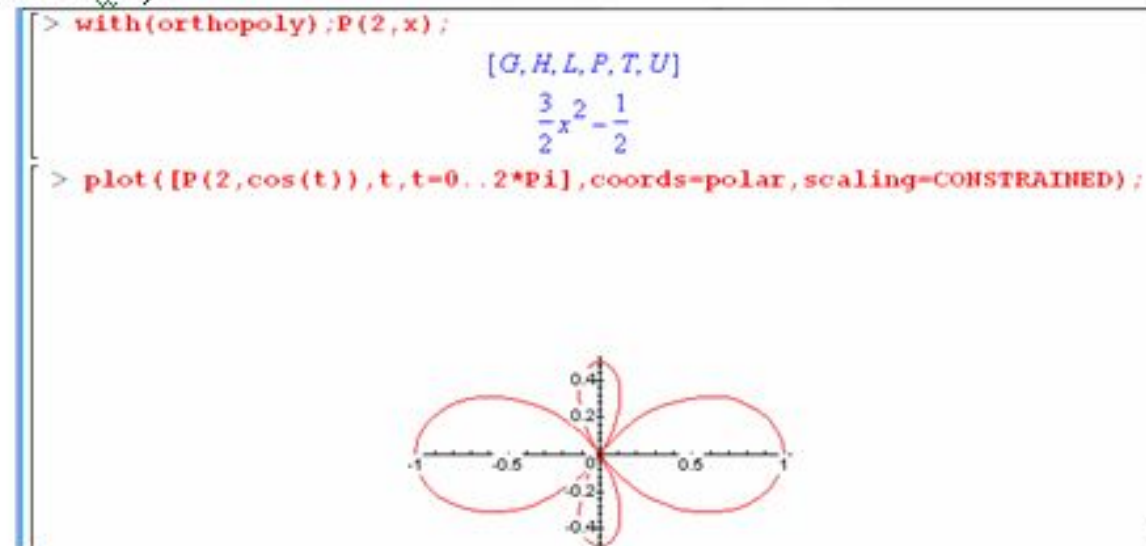
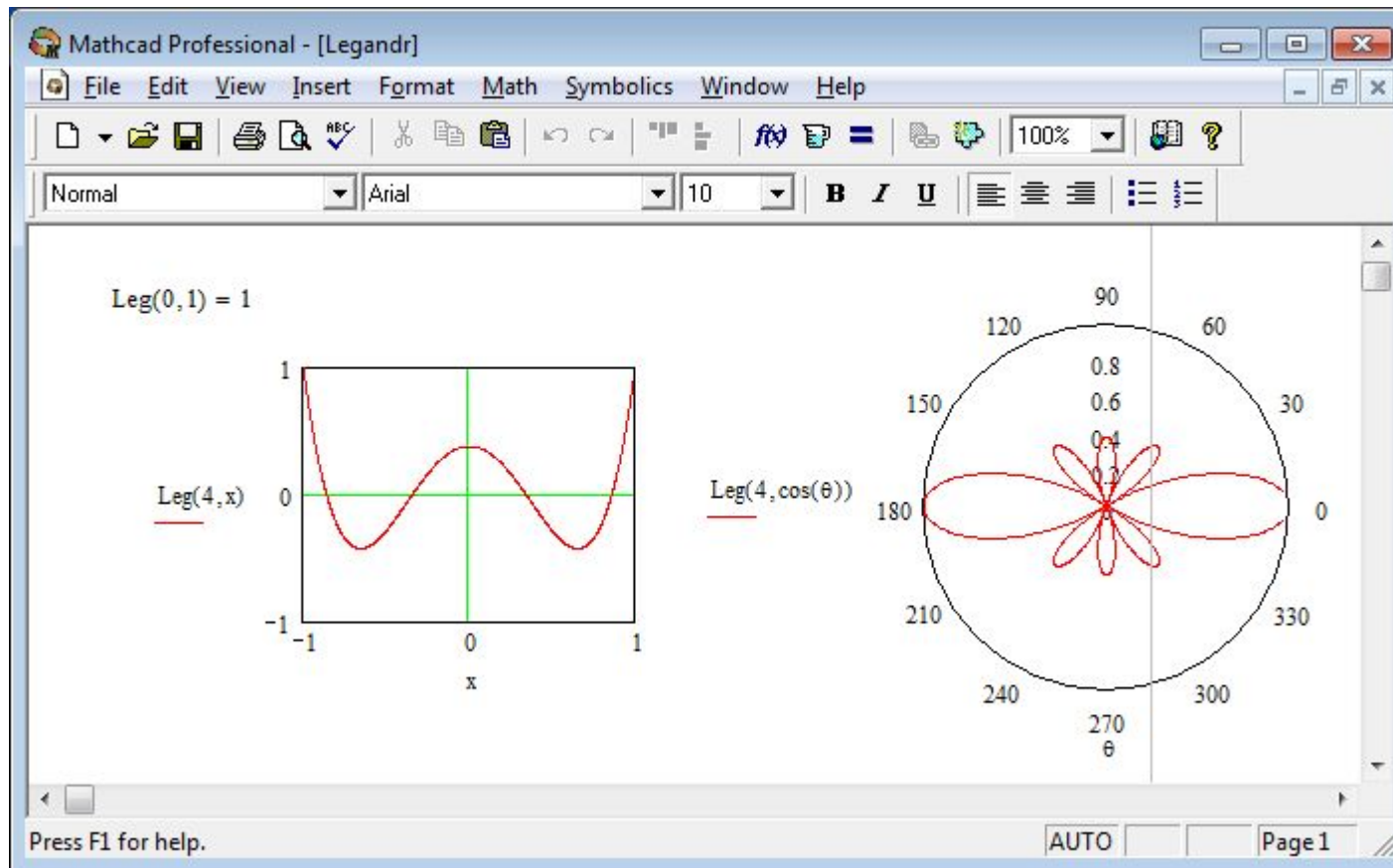


Рис. Пб.2. Построение угловой диаграммы для плотности вероятности $|Y_{20}(\theta)|^2$ с помощью программы Maple

Сферические гармоники и полиномы Лежандра: пример расчета в MathCAD

Функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ называются сферическими гармониками (или сферическими функциями), в случае $m = m_l = 0$ они выражаются через так называемые многочлены (полиномы) Лежандра

$$Y_{l0}(\theta) = C_l P_l(\cos \theta). \quad (5.16)$$



Атом водорода: радиальные волновые функции

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad R = \rho^l e^{-\rho/2} \omega(\rho) \quad \rho = \frac{2r}{a}$$

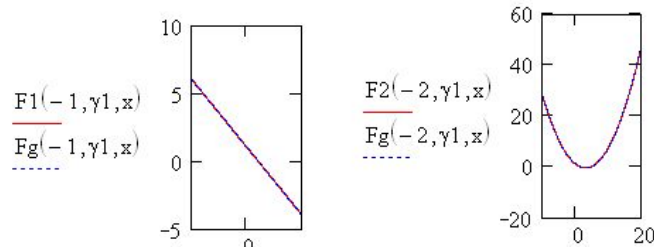
$$\omega = F(-n + l + 1, 2l + 2, \rho)$$

$$F(\alpha, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma} \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots$$

$$F1(\alpha, \gamma, z) := 1 + \alpha \cdot \frac{z}{\gamma \cdot 1} \quad F2(\alpha, \gamma, z) := 1 + \alpha \cdot \frac{z}{\gamma \cdot 1} + \frac{\alpha \cdot (\alpha + 1) \cdot z^2}{\gamma \cdot (\gamma + 1) \cdot 2!}$$

$$P1(k, \alpha) := \prod_{m=0}^{k-1} (m + \alpha) \quad \alpha 1 := -2 \quad \gamma 1 := 2$$

$$Fg(\alpha, \gamma, z) := 1 + \sum_{k=1}^{-\alpha} \left(\frac{P1(k, \alpha)}{P1(k, \gamma)} \right) \cdot \frac{z^k}{k!} +$$



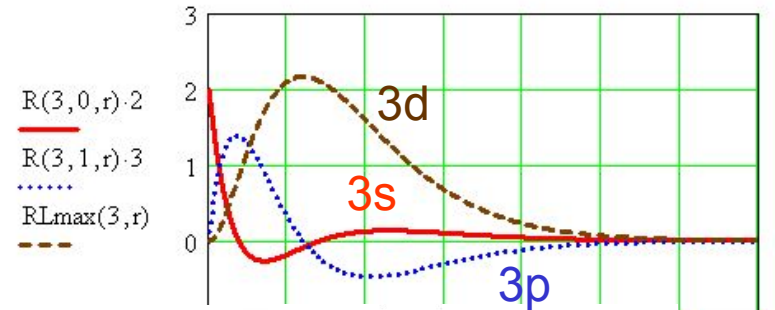
вырожденная гипергеометрическая функция

$$P1(k, \alpha) := \prod_{m=0}^{k-1} (m + \alpha) \quad Fg(\alpha, \gamma, z) := 1 + \sum_{k=1}^{-\alpha} \left(\frac{P1(k, \alpha)}{P1(k, \gamma)} \right) \cdot \frac{z^k}{k!}$$

$$R(n, L, r) := \left(\frac{r \cdot 2}{n} \right)^L \cdot \exp\left(\frac{-r}{n} \right) \cdot Fg\left[(-n + L + 1), (2 \cdot L + 2), \frac{r \cdot 2}{n} \right]$$

$$RLmax(n, r) := \left(\frac{r \cdot 2}{n} \right)^{n-1} \cdot \exp\left(\frac{-r}{n} \right) +$$

ненормированные волновые функции



— Л. Д. ЛАНДАУ и Е. М. ЛИФШИЦ 30 35

Если $m = 9,11 \cdot 10^{-31}$ г есть масса электрона, а $e = e^2$ (e — заряд электрона), то кулоновы единицы совпадают с так называемыми *атомными единицами*. Атомная единица длины

$$\hbar^2 / m e^2 = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см}$$

(так называемый *боровский радиус*). Атомная единица энергии равна

$$m e^4 / \hbar^2 = 4,36 \cdot 10^{-11} \text{ эрг} = 27,21 \text{ эВ}$$

(половину этой величины называют *ридбергом*, Ry). Атомная единица заряда есть $e = 4,80 \cdot 10^{-10}$ эл.-стат. единиц. Переход в формулах к атомным единицам производится, формально, положив $e = 1, m = 1, \hbar = 1$.

ТОМ III

КВАНТОВАЯ
МЕХАНИКА

НЕРЕЛЯТИВИСТСКАЯ
ТЕОРИЯ

Атом водорода: радиальные волновые функции

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad R = \rho^l e^{-\rho/2} \omega(\rho) \quad \rho = \frac{2r}{n}$$

$$\omega = F(-n + l + 1, 2l + 2, \rho)$$

вырожденная гипергеометрическая функция

$$F(\alpha, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma} \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots,$$

`Pg := (k, a) -> product((m+a), m=0..k-1);`

$$Pg := (k, a) \rightarrow \prod_{m=0}^{k-1} (m+a)$$

`Fg := (a, g, z) -> 1 + sum(Pg(k, a)/Pg(k, g) * z^k/k!, k=1..-a);`

$$Fg := (a, g, z) \rightarrow 1 + \left(\sum_{k=1}^{-a} \frac{Pg(k, a) z^k}{Pg(k, g) k!} \right)$$

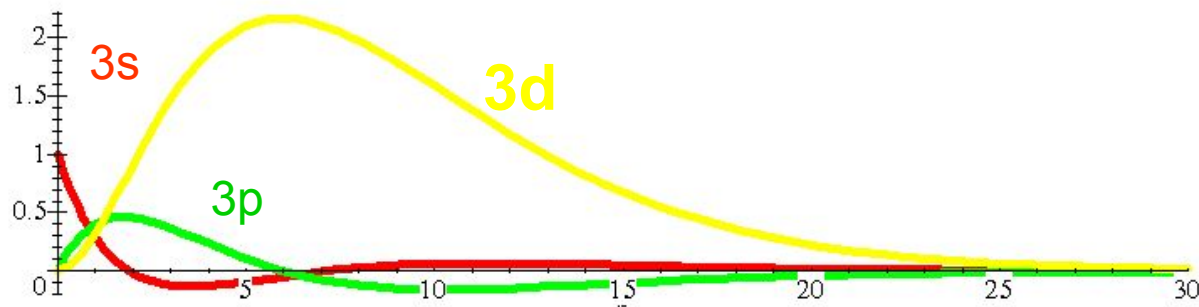
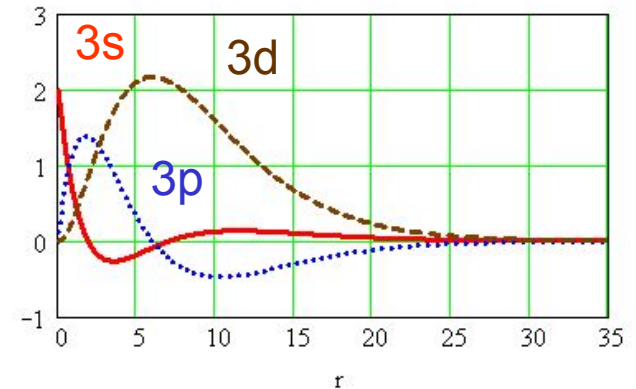
`Rf := (n, LL, r) -> (2*r/n)^LL * exp(-r/n) * Fg(-n+LL+1, 2*LL+2, 2*r/n);`

$$Rf := (n, LL, r) \rightarrow \left(2 \frac{r}{n} \right)^{LL} e^{-\frac{r}{n}} Fg\left(-n+LL+1, 2LL+2, 2 \frac{r}{n}\right)$$

`n:=3; L:=0; plot({Rf(n, 0, r), Rf(n, 1, r), Rf(n, 2, r)}, r=0..30, thickness=5, font=[SYMBOL, 12]);`

`n=3`

ненормированные волновые функции



Атом водорода: волновые функции

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Пример: $3p, n=3, l=1, m_l=0$

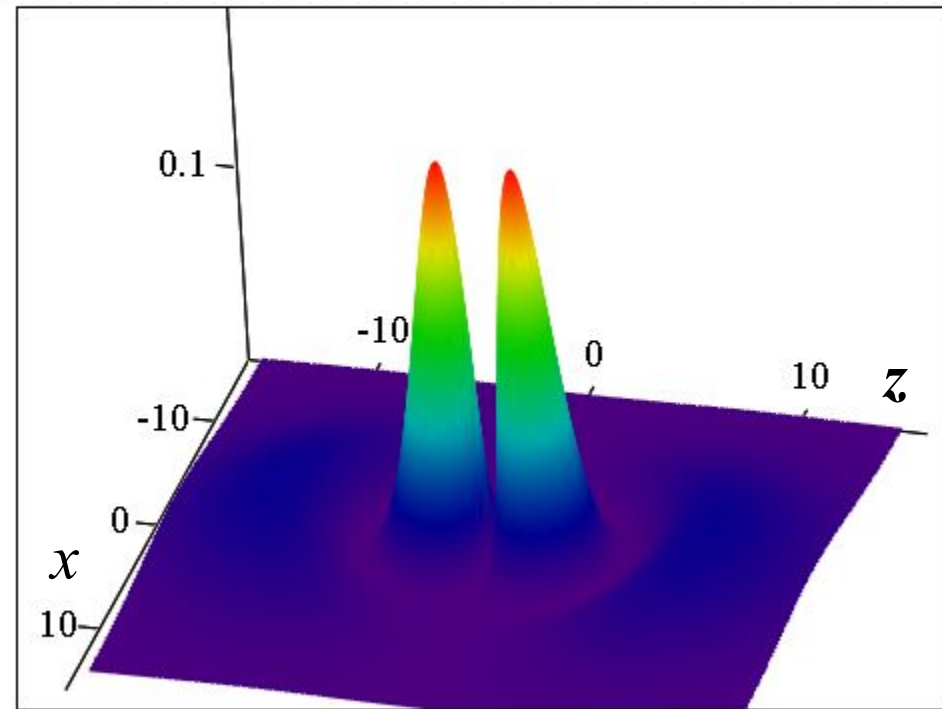
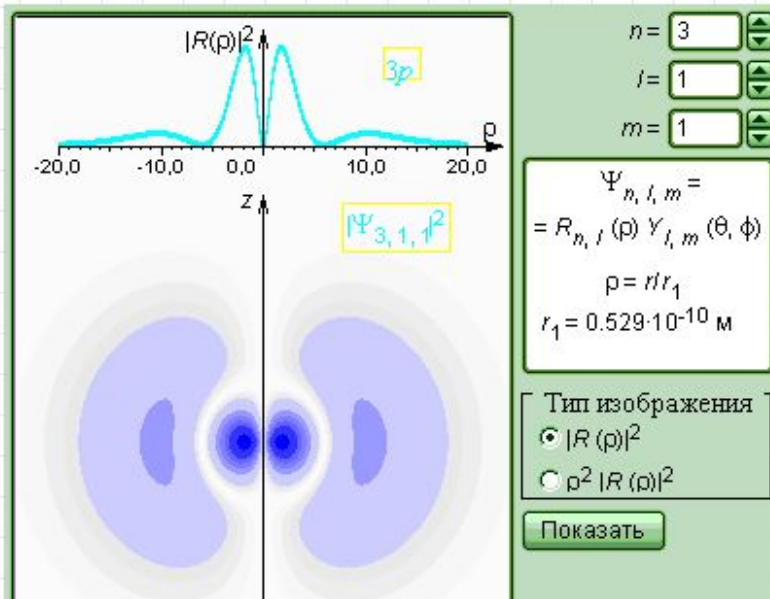
$$R_{nl}(r) = C_n r^{n-1} \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right), \quad l = n - 1,$$

$$R_{nl}(r) \rightarrow C_n r^{n-1} \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right), \quad r \rightarrow \infty, \quad 0 \leq l \leq n - 1.$$

nl := 3 L1 := 1

$$pd(x, z) := \left(R(nl, L1, \sqrt{x^2 + z^2}) \cdot \text{Leg}\left(1, \frac{z}{\sqrt{x^2 + z^2}}\right) \right)^2$$

 Модель 6.3. Атом водорода



pd

Атом водорода: волновые функции

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Пример: $3p$, $n=3$, $l=1$, $m_l=0$

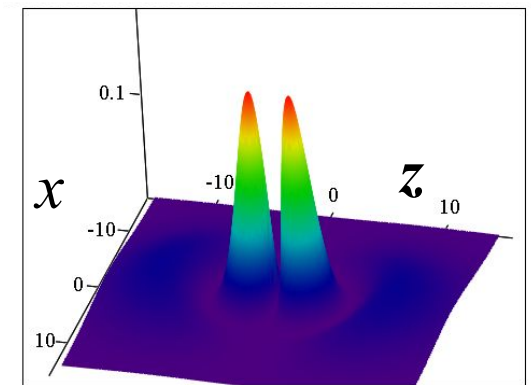
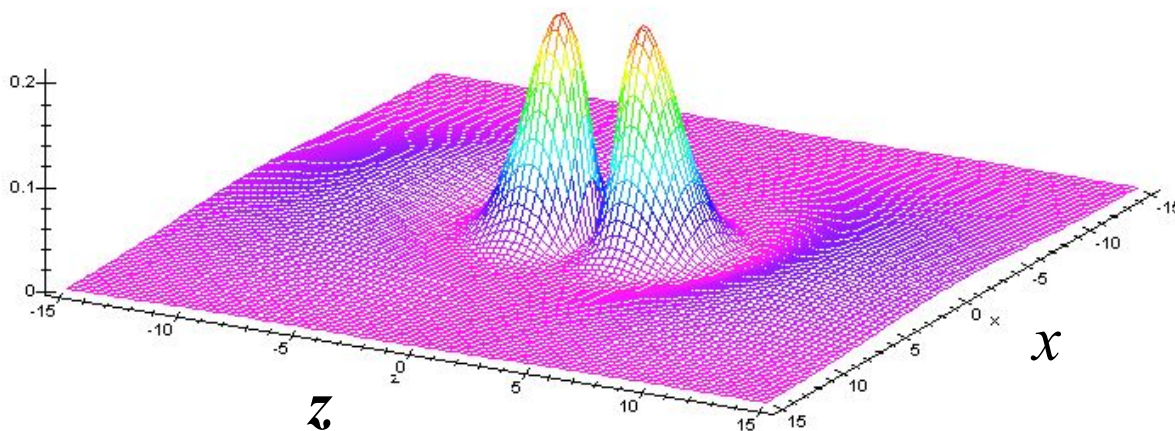
$$R_{nl}(r) = C_n r^{n-1} \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right), \quad l = n-1,$$

$$R_{nl}(r) \rightarrow C_n r^{n-1} \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right), \quad r \rightarrow \infty, \quad 0 \leq l \leq n-1.$$

nl := 3 LL := 1

$$pd(x, z) := \left(R(nl, LL, \sqrt{x^2 + z^2}) \cdot \text{Leg}\left(1, \frac{z}{\sqrt{x^2 + z^2}}\right) \right)^2$$

```
> n:=3;LL:=1;Pd:=(n,L,x,z)->(Rf(n,LL,sqrt(x*x+z*z))*P(LL,z/sqrt(x*x+z*z)))^2;
n=3
LL=1
Pd:=(n,L,x,z)->Rf(n,LL,sqrt(x*x+z*z))^2 * P(LL,z/sqrt(x*x+z*z))^2
> plot3d(Pd(n,LL,x,z),x=-15..15,z=-15..15,grid=[100,100]);
```



pd

Вопрос 6. Атом в магнитном и электрическом поле: стационарная теория возмущений.

- Стационарная теория возмущений в отсутствие вырождения.
- Стационарная теория возмущений при наличии вырождения.
- Эффект Зеемана
- Эффект Штарка

Стационарная теория возмущений в отсутствие вырождения

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}; \quad \hat{H}_0 \psi^{(0)} = E^{(0)} \psi^{(0)}; \quad (\hat{H}_0 + \hat{V}) \psi = E \psi$$

$$\psi = \sum_m c_m \psi_m^{(0)}; \quad (E - E_k^{(0)}) c_k = \sum_m V_{km} c_m; \quad V_{km} = \int \psi_k^{(0)*} \hat{V} \psi_m^{(0)} dq$$

$$E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}; \quad c_k = \delta_{kn} + c_k^{(1)}; \quad \text{äëÿ } k = n: \quad E_n^{(1)} = V_{nn} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} dq$$

$$\text{длЯ } k \neq n: \quad c_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}; \quad c_n^{(1)} = 0; \quad \psi_n^{(1)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_m^{(0)}$$

$$|V_{mn}| \ll |E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|; \quad E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}; \quad E_0^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} < 0$$

Стационарная теория возмущений при наличии вырождения

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}; \quad \hat{H}_0 \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)}; \quad \hat{H}_0 \Psi_{n'}^{(0)} = E_{n'}^{(0)} \Psi_{n'}^{(0)}, \dots$$

$$\Psi = \sum_m c_m \Psi_m^{(0)}; \quad (E - E_k^{(0)}) c_k = \sum_m V_{km} c_m; \quad V_{km} = \int \Psi_k^{(0)*} \hat{V} \Psi_m^{(0)} dq$$

$$E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} \text{ для } c_n = c_n^{(0)}, c_{n'} = c_{n'}^{(0)}, \dots; \quad 0, \text{ для } E_n^{(0)} = E_{n'}^{(0)} = \dots \quad c_k = \quad E_k^{(0)} \neq E_n^{(0)}$$

$$E_n^{(1)} c_n = \sum_{n'} V_{nn'} c_{n'}^{(0)}; \quad \sum_{n'} (V_{nn'} - E_n^{(1)} \delta_{nn'}) c_{n'}^{(0)} = 0; \quad |V_{nn'} - E_n^{(1)} \delta_{nn'}| = 0$$

секулярное уравнение

Эффект Зеемана – расщепление спектральных линий и уровней энергии атома в однородном магнитном поле (без учета спина)

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\Phi; \quad \hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + U; \quad \vec{A} = \frac{1}{2} [\nabla \times \vec{r}]$$

$$\hat{H} = H_0 + \frac{|e|}{mc} \sum_a A_a p_a + \frac{e^2}{2mc^2} \sum_a A_a^2; \quad \text{Магнетон Бора}$$

$$\hat{H} \approx \hat{H}_0 + \frac{|e|}{2mc} \hbar \sum_a [\vec{r}_a \times \vec{p}_a] = \hat{H}_0 + \mu_B \vec{L} \cdot \vec{H}; \quad \mu_B = \frac{|e| \hbar}{2mc} \quad \Psi = \sum_{M=-L}^L c_M \Psi_M^{(0)}$$

Поправка к энергии состояния с орбитальным моментом L по формуле для наличия вырождения по орбитальному магнитному квантовому числу $M=-L, \dots, L$

$$V_{M'M} = \int \Psi_{LM'}^{(0)*} \hat{V} \Psi_{LM}^{(0)} dq = \mu_B H_z \int \Psi_{LM'}^{(0)*} \hat{L}_z \Psi_{LM}^{(0)} dq = \mu_B H_z \int \Psi_{LM'}^{(0)*} M \Psi_{LM}^{(0)} dq$$

$$= \mu_B H_z M \delta_{M'M} \quad \left| V_{M'M} - E_M^{(1)} \delta_{M'M} \right| = 0 \quad \left| \mu_B H_z M \delta_{M'M} - E_M^{(1)} \delta_{M'M} \right| = 0$$

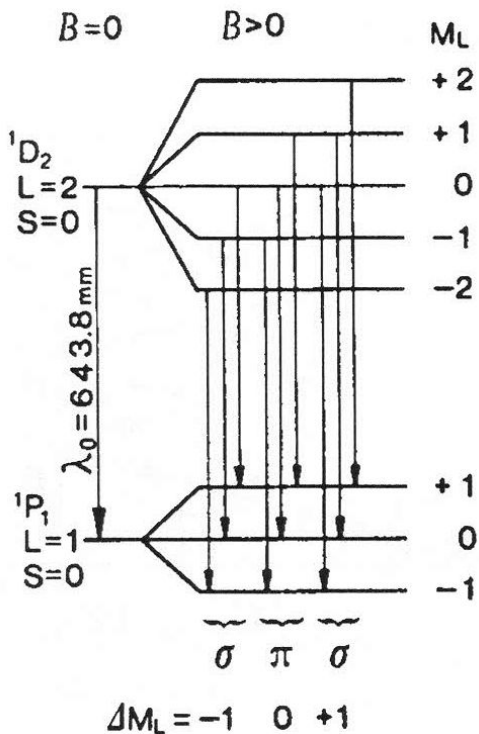
Поправка к энергии по формуле для отсутствия вырождения

$$E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}; \quad E_n^{(1)} = \Delta E = \mu_B |\vec{H}| \bar{L}_z = \mu_B |\vec{H}| M_L; \quad M_L = -L, \dots, L$$

$$L=0: E_n^{(1)} = 0, \quad \Delta E = \frac{e^2}{2mc^2} \sum_a \overline{A_a^2} = \frac{e^2}{8mc^2} \sum_a \overline{[\nabla \times \vec{r}_a]^2} = \frac{15}{12mc^2} \hbar^2 \sum_a \overline{r_a^2};$$

Эффект Зеемана – расщепление спектральных линий и уровней энергии атома в однородном магнитном поле (без учета спина)

$$E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}; \quad E_n^{(1)} = \Delta E = \mu_B \left| \vec{H} \right| \bar{L}_z = \mu_B \left| \vec{H} \right| M_L; \quad M_L = -L, \dots, L$$

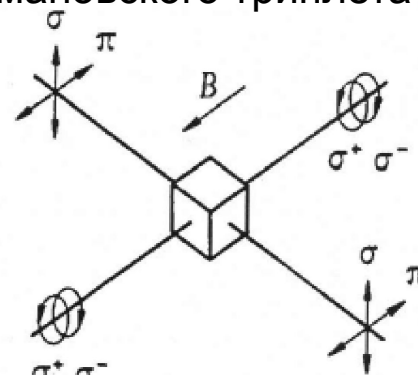


Расщепление синглетных энергетических уровней атома кадмия на $2L+1$ подуровней в магнитном поле и переходы, разрешенные правилами отбора $\Delta M_L = 0, \pm 1$

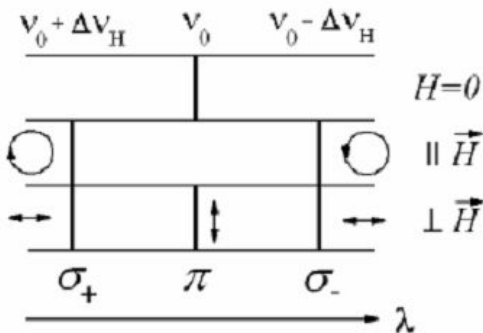
Разность энергий между соседними подуровнями одинакова для всех синглетных уровней

Расщепление в магнитном поле линий спектра на три компоненты называется *простым эффектом Зеемана*

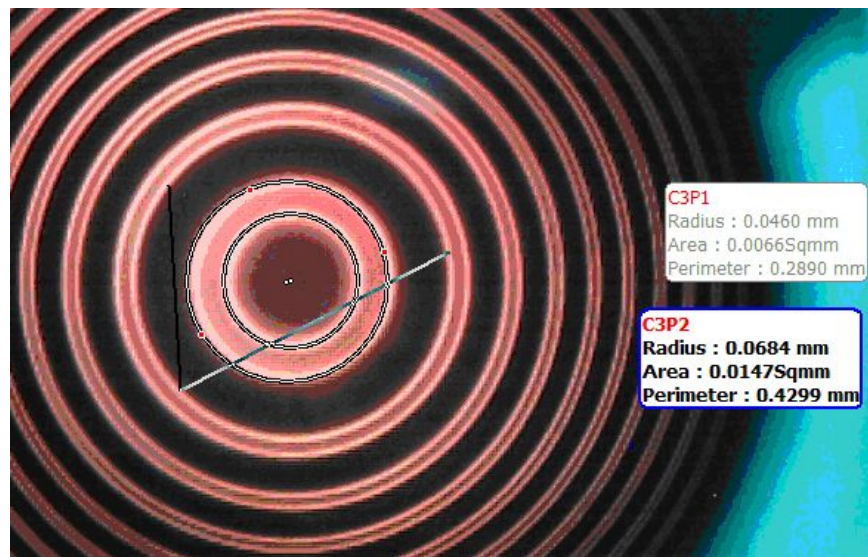
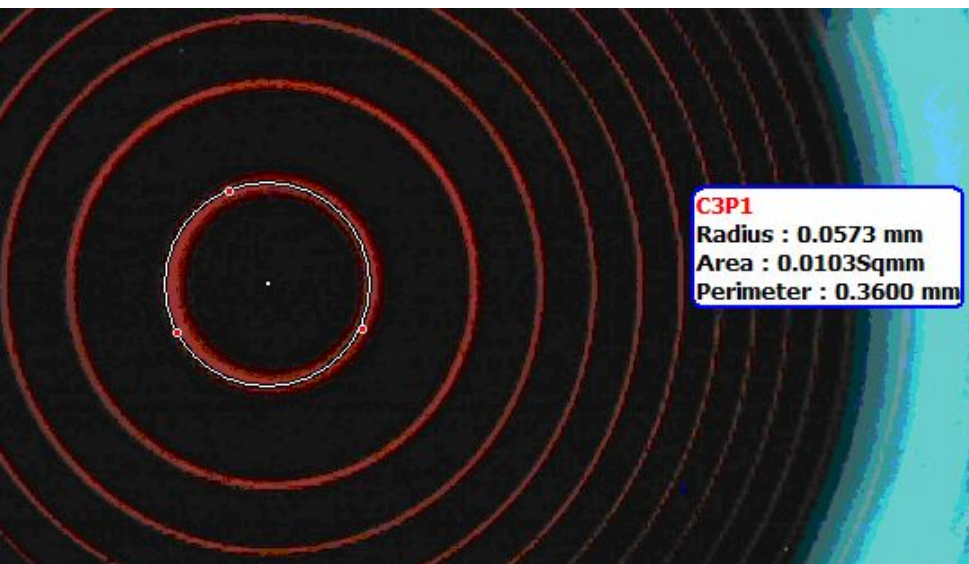
поляризация π - и σ -компонент зеемановского триплета



Простой эффект Зеемана (без учета спина) для $S=0$ в слабом поле или с учетом спина в сильном поле



Эффект Зеемана – расщепление красной спектральной линии атома кадмия в однородном магнитном поле (без учета спина)



Изображение интерференционной картины на экране компьютера с без магнитного поля. Использован интерферометр Фабри-Перо.

Изображение интерференционной картины на экране компьютера для простого “поперечного” эффекта Зеемана

Наблюдения спектров излучения чаще всего производят по нормали к направлению магнитного поля (“поперечный” эффект Зеемана) или по направлению поля (“продольный” эффект Зеемана). При продольном эффекте Зеемана видны только смещенные σ -компоненты зеемановского триплета, которым соответствует циркулярно поляризованный свет. Двум направлениям круговой поляризации (по и против часовой стрелки) соответствуют два возможных значения проекции момента импульса фотона на направление движения и два значения проекции спина фотона. При наблюдении поперек поля эти линии оказываются линейно поляризованными. Вектор напряженности электрического поля E колеблется перпендикулярно направлению магнитного поля. Несмещенная π -компонента не видна при наблюдении вдоль поля, а при наблюдении поперек поля линейно поляризована, причем вектор E колеблется вдоль направления магнитного поля.

Эффект Штарка - расщепление спектральных линий и уровней энергии в однородном электрическом поле

$$V = -\vec{E}d = -|\vec{E}|d_z$$

1. Атом водорода: линейный эффект Штарка

$$E_n^{(1)}c_n = \sum_{n'} V_{nn'}c_{n'}^{(0)}; \quad \sum_{n'} (V_{nn'} - E_n^{(1)}\delta_{nn'})c_{n'}^{(0)} = 0; \quad |V_{nn'} - E_n^{(1)}\delta_{nn'}| = 0$$

2. Сложный атом: квадратичный эффект Штарка

$$E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}; \quad c_k = \delta_{kn} + c_k^{(1)}; \quad k = n: E_n^{(1)} = V_{nn} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} dq = 0$$

$$|V_{mn}| \propto |E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|; \quad E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}; \quad E_0^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} < 0$$

Эффект Штарка:

1. Линейный у атома водорода и водородоподобных атомов (в слабых полях), связан с вырождением уровней энергии по орбитальному квантовому числу в кулоновском поле. Средний дипольный момент таких атомов не равен нулю. Энергия подуровней зависит от главного квантового числа, орбитального квантового числа и модуля магнитного орбитального квантового числа. Например состояние с $n=2$ расщепляется на 3 подуровня, в общем случае на $2n-1$ подуровень.

2. Квадратичный у атома водорода и водородоподобных атомов в сильных полях, у многоэлектронных атомов с нулевым средним дипольным моментом.

Литература

1. Сивухин, Д. В. Общий курс физики. В 5 Т. Т 5: Атомная и ядерная физика: учеб. пособие— М.: Физматлит, 2002
2. Ландау Л.Д. Лифшиц Е.М. Краткий курс теоретической физики. Т. 2. Квантовая механика. – М. Наука. 1971.

Вопрос 7. Релятивистские эффекты в водородоподобном атоме.

- Уравнение Дирака.
- Квазирелятивистское приближение.
- Спин-орбитальное взаимодействие.
- Тонкая структура спектра атома водорода.

Уравнение Дирака

Свободное движение

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (c\alpha \hat{p} + mc^2 \beta) \Psi; \Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}; \phi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}; \chi = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix};$$

Матрицы Паули

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}; \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}; \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix};$$

Состояния с определенным значением импульса p и энергии ε

$$\begin{cases} (mc^2 - \varepsilon)\phi + c\sigma p \chi = 0 \\ -c\sigma p \phi + (mc^2 + \varepsilon)\chi = 0 \end{cases}; \begin{vmatrix} mc^2 - \varepsilon & c\sigma p \\ -c\sigma p & mc^2 + \varepsilon \end{vmatrix} = 0; \varepsilon = \pm c\sqrt{p^2 + m^2 c^2}$$

положительные и отрицательные "частоты"

Операторы проекций внутреннего углового момента (спинового момента)

$$\hat{s} = \frac{\hbar}{2} \sigma \quad \text{Оператор спина} \quad \hat{s} = \frac{\hbar}{2} \sigma = (\hat{s}_1, \hat{s}_2, \hat{s}_3)$$

Движение в электромагнитном поле

$\hat{p} \rightarrow \hat{p} - \frac{e}{c} A$; $\varepsilon \rightarrow \varepsilon - eA_0$ для электрона $e < 0$

Для атома водорода

$$\begin{cases} c\sigma p \chi = (\varepsilon - mc^2)\phi \\ c\sigma p \phi = (\varepsilon + mc^2)\chi \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} c\sigma \left(\hat{p} - \frac{e}{c} A \right) \chi = (\varepsilon - eA_0 - mc^2)\phi \\ c\sigma \left(\hat{p} - \frac{e}{c} A \right) \phi = (\varepsilon - eA_0 + mc^2)\chi \end{cases}$$

В центральном поле

$$\hat{j} = \hat{l} + \hat{s}$$

Шаровые спиноры – собственные функции

$$\hat{j}^2, \hat{l}^2, \hat{j}_z^2$$

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(r)\Omega_{j,l,m} \\ (-1)^{\frac{1+l-l'}{2}} g(r)\Omega_{j,l',m} \end{pmatrix}; \quad \begin{matrix} l = j \pm 1/2; \\ l' = 2j - l; \end{matrix} \quad \Omega_{l+1/2,l,m} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}} Y_{l,m-1/2} \\ \sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} Y_{l,m+1/2} \end{pmatrix}$$

$$\Omega_{l-1/2,l,m} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} Y_{l,m-1/2} \\ \sqrt{\frac{j+m+1/2}{2l+1}} Y_{l,m+1/2} \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} f' + \frac{1+\kappa}{r} f - \frac{1}{c} (\varepsilon + mc^2 + e^2/r) g = 0 \\ g' + \frac{1-\kappa}{r} g + \frac{1}{c} (\varepsilon - mc^2 + e^2/r) f = 0 \end{cases} \begin{cases} f = \sqrt{\varepsilon + mc^2} \rho^{\gamma-1} e^{-\rho/2} (Q_1 + Q_2) \\ g = -\sqrt{mc^2 - \varepsilon} \rho^{\gamma-1} e^{-\rho/2} (Q_1 - Q_2) = 0 \end{cases}$$

$$\kappa = \begin{cases} -(j+1/2) = -(l+1), j = l+1/2; \\ j+1/2 = l, j = l-1/2; \end{cases}$$

$$n_r = \begin{cases} 0, 1, 2, \dots, \kappa < 0, j = l+1/2; \\ 1, 2, 3, \dots, \kappa \geq 0, j = l-1/2; \end{cases}$$

$$n_r = \frac{\alpha \varepsilon}{c \lambda(\varepsilon)} - \gamma; \quad \text{целое положительное число} \quad \mathbf{21}$$

Решение уравнения Дирака для атома водорода: энергии

$$\kappa = \begin{cases} -(j+1/2) = -(l+1), j = l+1/2; \\ j+1/2 = l, j = l-1/2; \end{cases} \quad n_r = \begin{cases} 0, 1, 2, \dots, \kappa < 0, j = l+1/2; \\ 1, 2, 3, \dots, \kappa \geq 0, j = l-1/2; \end{cases} \quad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

$$E(n_r, j) = \varepsilon - mc^2 = mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{(n_r + \sqrt{\kappa^2 - \alpha^2})^2}}} - 1 \right) = mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{(n_r + |\kappa| \sqrt{1 - \alpha^2/\kappa^2})^2}}} - 1 \right) \approx$$

точное выражение
приближенные выражения

$$\approx mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{(n_r + |\kappa| - \alpha^2/(2|\kappa|)})^2}}} - 1 \right) \approx mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{(n_r + |\kappa|)^2 (1 - \alpha^2/(2|\kappa|(n_r + |\kappa|)))^2}}} - 1 \right) \approx$$

$$\approx mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{(n_r + |\kappa|)^2} \left(1 + 2\alpha^2/(2|\kappa|(n_r + |\kappa|))\right)}} - 1 \right) \approx$$

$$\approx mc^2 \left[-\frac{\alpha^2}{2(n_r + |\kappa|)^2} \left(1 + 2\alpha^2/(2|\kappa|(n_r + |\kappa|))\right) + \frac{1 \cdot 2}{3 \cdot 4} \left(\frac{\alpha^2}{(n_r + |\kappa|)^2} \left(1 + 2\alpha^2/(2|\kappa|(n_r + |\kappa|))\right) \right)^2 \right] \approx$$

$$\approx \frac{mc^2 \alpha^2}{2(n_r + |\kappa|)^2} \left\{ 1 + \frac{\alpha^2}{(n_r + |\kappa|)} \left[\frac{1}{|\kappa|} - \frac{3}{4(n_r + |\kappa|)} \right] \right\}; \quad n_r + |\kappa| = n; \quad |\kappa| = j + \frac{1}{2}; \quad mc^2 \alpha^2 = \frac{me^4}{\hbar^2}$$

$$E(n, j) = -\frac{1}{n^2} \frac{e^2}{2a_B} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right]; \quad a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad \text{приближенное выражение}$$

Решение уравнения Дирака для водородоподобного атома : ЭНЕРГИЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

$$\begin{cases} \text{свр}\chi = (\varepsilon - mc^2 + Ze^2/r)\phi \\ \text{свр}\phi = (\varepsilon + mc^2 + Ze^2/r)\chi \end{cases} \quad Z\alpha = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} \approx \frac{Z}{137}$$

СИ Гауссова система единиц

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

$$n_0 = 0, \kappa_0 = -1$$

$$nl := 0 \quad jl := \frac{1}{2} \quad \alpha = 7.299 \times 10^{-3} \quad \frac{1}{\alpha} = 137$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 &= \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{Z^2\alpha^2}{\left(n_0 + \sqrt{\kappa_0^2 - Z^2\alpha^2}\right)^2}}} = \\ &= mc^2 + E(n_r = 0, j = \frac{1}{2}) = mc^2(1 + \varepsilon_1) \end{aligned}$$

$$\varepsilon_1(Z) := \left[\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2 \cdot Z^2}{\left[nl + \sqrt{\left(jl + \frac{1}{2} \right)^2 - \alpha^2 \cdot Z^2} \right]^2}}} - 1 \right]$$

$$\varepsilon_1(1) \cdot mc^2 = -13.632 \quad mc^2 = 511710$$

$$\varepsilon_0(Z) := \left[\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2 \cdot Z^2}{\left[nl + \sqrt{\left(jl + \frac{1}{2} \right)^2 - \alpha^2 \cdot Z^2} \right]^2}}} \right]$$

В «необрезанном» кулоновом поле энергия ε_1 нижнего уровня обращается при $Z\alpha = 1$ в нуль и кривая зависимости $\varepsilon_1(Z)$ обрывается — при $Z\alpha > 1$ уровень ε_1 становится мнимым.

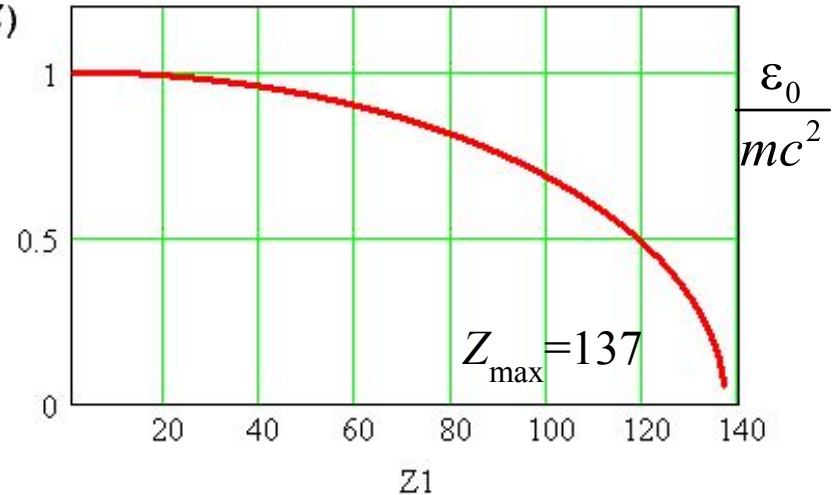
Чисто кулоново поле можно рассматривать в теории Дирака лишь при $Z\alpha < 1$, т.е. $Z < 137$.

В. Б. БЕРЕСТЕЦКИЙ

Е. М. ЛИФШИЦ

Л. П. ПИТАЕВСКИЙ

$\varepsilon_0(Z_1)$



ТОМ IV

КВАНТОВАЯ
ЭЛЕКТРОДИНАМИКА

Решение уравнения Дирака для водородоподобного атома с ядром конечного размера: энергия основного состояния

Остановимся на качественном описании ситуации, возникающей при $Z > 137$. Снова, чтобы избежать неопределенности в граничном условии при $r = 0$, следует рассматривать потенциал, обрезанный на некотором расстоянии r_0 (И. Я. Померанчук, Я. А. Смородинский, 1945). Это имеет не только формальный, но и прямой физический смысл. Заряд $Z > 137$ фактически может быть сосредоточен только в некотором «сверхтяжелом» ядре конечного радиуса. Рассмотрим поэтому, как меняется расположение уровней с увеличением Z при заданном r_0 .

В «обрезанном» же поле, при заданном $r_0 \neq 0$, уровень ε_1 проходит через нуль лишь при некотором $Z\alpha > 1$. Но значение $\varepsilon_1 = 0$ никак не выделено физически, а при $r_0 \neq 0$ оно ничем не выделено и формально — кривая зависимости $\varepsilon_1(Z)$ здесь не обрывается. При дальнейшем увеличении Z уровни продолжают понижаться, и при некотором «критическом» значении $Z = Z_c(r_0)$ энергия ε_1 достигает границы $(-m)$ нижнего континуума уровней. Как было объяснено в предыдущем параграфе, это означает обращение в нуль энергии, требуемой для рождения свободного позитрона. Поэтому критическое значение Z_c — это максимальный заряд, которым может обладать «голое» ядро при заданном r_0 .

При $Z > Z_c$ уровень $\varepsilon_1 < -m$ и становится энергетически выгодным рождение двух электрон-позитронных пар. Позитроны уходят на бесконечность, унося кинетическую энергию $2(|\varepsilon_1| - m)$, а два электрона заполняют уровень ε_1 . В результате образуется «ион» с заполненной K -оболочкой и зарядом $Z_{эф} = Z - 2$ (С. С. Герштейн, Я. Б. Зельдович, 1969). Эта система устойчива при $Z > Z_c$, вплоть до значений Z , когда границы $-m$ достигнет следующий уровень¹⁾.

¹⁾ Так, если заряд ядра равномерно распределен в сфере радиуса $r_0 = 1,2 \cdot 10^{-12}$ см, критическое значение $Z_c = 170$, а следующий уровень достигает границы $-m$ при $Z = 185$ (В. С. Попов, 1970). Подробное изложение количественной теории — см. обзорную статью Я. Б. Зельдовича и В. С. Попова (УФН. — 1971. — Т. 105. — С. 403).

Квазирелятивистское приближение.

Нерелятивистское движение в слабом электромагнитном поле $\varepsilon = E' + mc^2$; $|E' - eA_0| \ll mc^2$

$$\begin{cases} c\hat{\sigma}\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A}\right)\chi = (\varepsilon - eA_0 - mc^2)\phi \\ c\hat{\sigma}\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A}\right)\phi = (\varepsilon - eA_0 + mc^2)\chi \end{cases} \Rightarrow \left\{ \frac{1}{2m}\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A}\right)^2 + eA_0 - \frac{e}{2mc}(\hat{\sigma}\hat{H}) \right\} \phi = E'\phi; \hat{H} = \text{rot}\hat{A}; \text{ Уравнение Паули}$$

Для электрона $e < 0$ $-\frac{e}{2mc}(\hat{\sigma}\hat{H}) = -\hat{\mu}\hat{H} = 2\mu_0 \hat{s} \hat{H}; \mu_0 = \frac{|e|\hbar}{2mc}; \hat{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc}\hat{\sigma} = -\frac{|e|\hbar}{2mc}\hat{\sigma} = -2\mu_0 \hat{s}$

Магнетон Бора

Движение в слабом центральном электростатическом поле $eA_0 = V(r)$
с точностью до членов порядка v^2/c^2

$$\left\{ \frac{1}{2m}\hat{p}^2 - V(r) - W_1 - W_2 - W_3 \right\} \Psi = E'\Psi$$

$$E'g\phi = E'\Psi = (gH'g^{-1})g\phi = H\Psi$$

$$\Psi = g\phi = \left(1 - \frac{\hat{p}^2}{4m^2c^2}\right)^{1/2} \phi \approx \left(1 - \frac{\hat{p}^2}{8m^2c^2}\right) \phi$$

$$W_1 = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \Delta V \quad \text{Оператор контактного взаимодействия}$$

В кулоновском поле $V(r) = -e^2Z/r$

$$W_1 = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \Delta V = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} 4\pi Ze^2 \delta(r)$$

$$W_2 = -\frac{[E' - V]^2}{2mc^2} \quad \text{Поправка к оператору кинетической энергии, из-за изменения массы частицы при изменении ее скорости}$$

$$W_3 = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \hat{\sigma} [(\nabla V) \hat{p}] = \frac{\hbar}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \left(\hat{s} \hat{L} \right)$$

Оператор спин-орбитального взаимодействия

Спин-орбитальное взаимодействие

Причиной дублетной (тонкой) структуры спектральных линий щелочных элементов и водорода является дублетная тонкая структура части их энергетических уровней. Схема тонкой структуры уровней двух щелочных элементов – натрия и калия, поясняющая образование дублетов главной и резкой серий показана на рис. 9.1. Тонкая структура спектральных линий была открыта и исследована Майкельсоном*1.

Тонкая структура уровней энергии (называемая также мультиплетным расщеплением) – расщепление уровней энергии (термов) электронов в атомах (см. также работу 9), молекулах (см. работу 13), кристаллах обусловлено, главным образом, спин-орбитальным взаимодействием. Спин-орбитальное взаимодействие в атомах, молекулах, кристаллах является проявлением электромагнитного взаимодействия. В релятивистской квантовой теории Дирака*2 его рассматривают как взаимодействие между *спиновым* и *орбитальным магнитными моментами* электрона. Первый является собственным магнитным моментом, обусловленным наличием у электрона собственного механического момента – *спина* $s=1/2$, не связанного с движением электрона в пространстве. Второй магнитный момент связан с орбитальным движением (током) электрона.

Сложение орбитального механического момента (момента импульса) электрона и его спинового момента приводит к новому квантовому числу электрона в атоме – числу j полного момента. В результате сложения орбитального момента $l \neq 0$ и спина $s=1/2$ квантовое число полного момента может принимать два значения j_1 и j_2

$$j_1 = l - 1/2, \quad j_2 = l + 1/2. \quad (9.1)$$

При $l=0$ в отсутствие орбитального момента полный момент равен спиновому, а число j имеет единственное значение $j=1/2$.

Каждый энергетический уровень (кроме s-уровней с квантовым числом $l=0$) с энергией $E = E(n, l)$, зависящей от главного квантового числа n и орбитального квантового числа l , расщепляется на два близких подуровня с энергиями

$$E_1 = E(n, l) + \delta E_1, \quad E_2 = E(n, l) + \delta E_2. \quad (9.2)$$

Поправка к энергии состояний электрона зависит от j : $\delta E = \delta E(j, n, l)$.

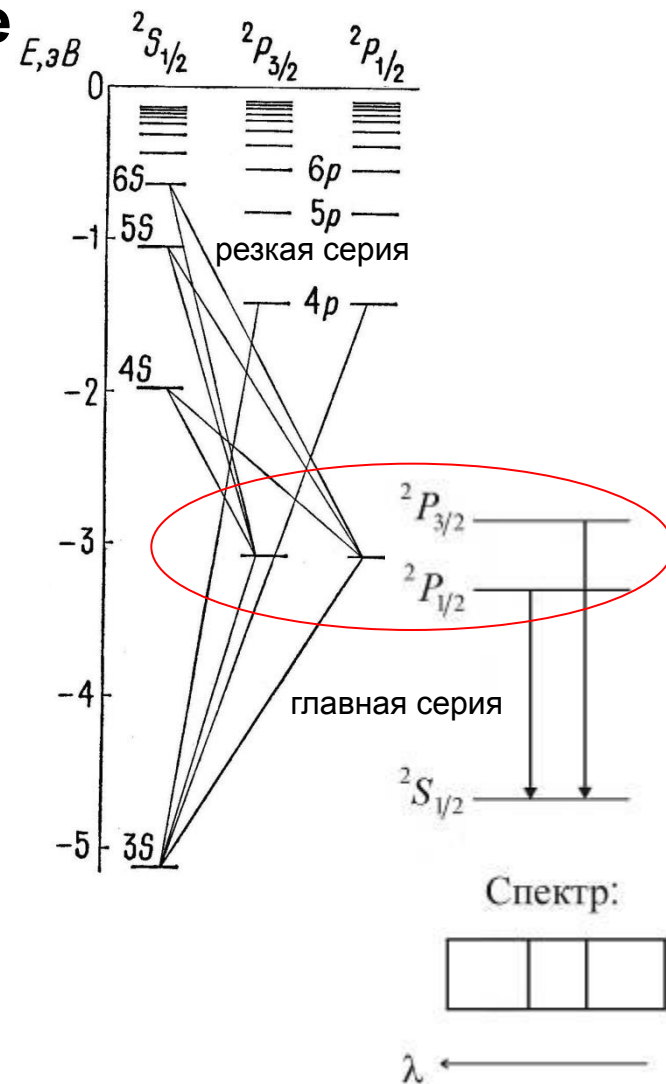


Схема образования дублетных линий главной и резкой серий натрия

Спин-орбитальное взаимодействие.

Для водородоподобного атома точное решение уравнения Шредингера с учетом спин-орбитального взаимодействия приводит к выражению для энергий уровней, несколько отличному от (9.2) $\approx E(n) = -hcRZ^2/n^2$ и (9.10), (9.11)

$$E(n, j) = -\frac{hcRZ^2}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right]. \quad (9.12)$$

Приближенное вычисление (в рамках так называемой теории возмущений квантовой механики) приводят к следующему выражению для величины δE

$$E = E(n, l) + \delta E \quad \delta E(j, n, l) = \zeta(n, l) \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)], \quad (9.3)$$

где величина $\zeta(n, l) > 0$ называется постоянной расщепления

$$\zeta(n, l) = \frac{\hbar^2}{2m_e^2 c^2} \int_0^\infty U'(r) R_{nl}^2(r) r dr. \quad (9.4)$$

Разность энергий $\Delta E = |\delta E_1 - \delta E_2| = E(n, j_2) - E(n, j_1)$ в обоих приближениях (9.2), (9.10), (9.11) и (9.12) одинакова

$$\Delta E(n, l) = \frac{hcR\alpha^2 Z^4}{n^3} \left(\frac{1}{l(l+1)(l+1/2)} \frac{l+1}{2} + \frac{1}{l(l+1)(l+1/2)} \frac{l}{2} \right) = \frac{hcR}{n^3} \frac{\alpha^2 Z^4}{l(l+1)}, \quad (9.13)$$

Для многоэлектронных атомов из-за экранирования поля ядра внутренними электронами разность энергий ΔE для валентных электронов возрастает с ростом атомного номера Z приблизительно пропорционально Z^γ , $1.5 < \gamma < 2$, см. табл. 9.2. Поэтому с увеличением атомного номера возрастает и разность длин волн дублетов (см. табл. 9.1). Формулы (9.2)-(9.13) применимы, пока расщепление соседних уровней гораздо меньше расстояния между ними.

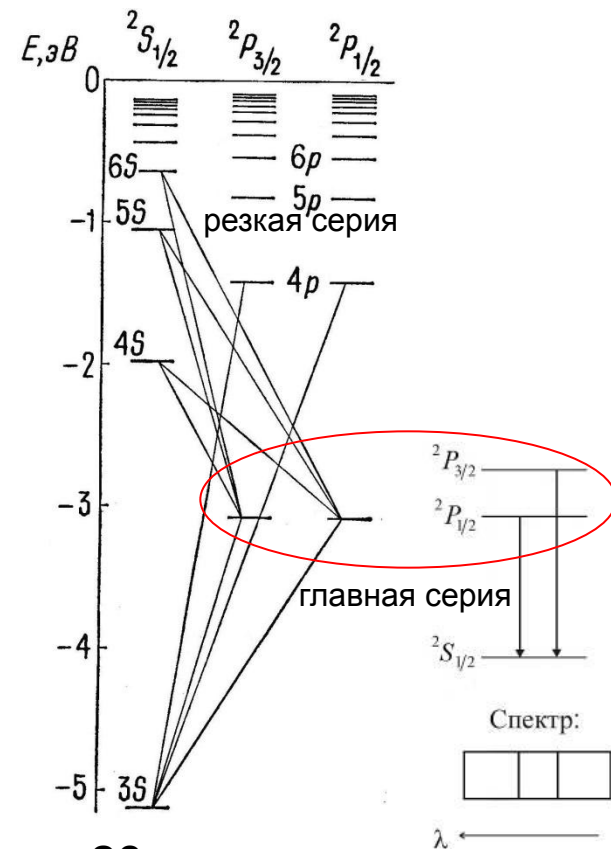
Щелочной элемент	Z	l	ΔE , эВ
Натрий, Na	11	1	0,002
Калий, K	19	1	0,007
Цезий, Cs	55	1	0,07

Водород $\Delta E = 4 \cdot 10^{-5}$ эВ

где α – постоянная тонкой структуры

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137},$$

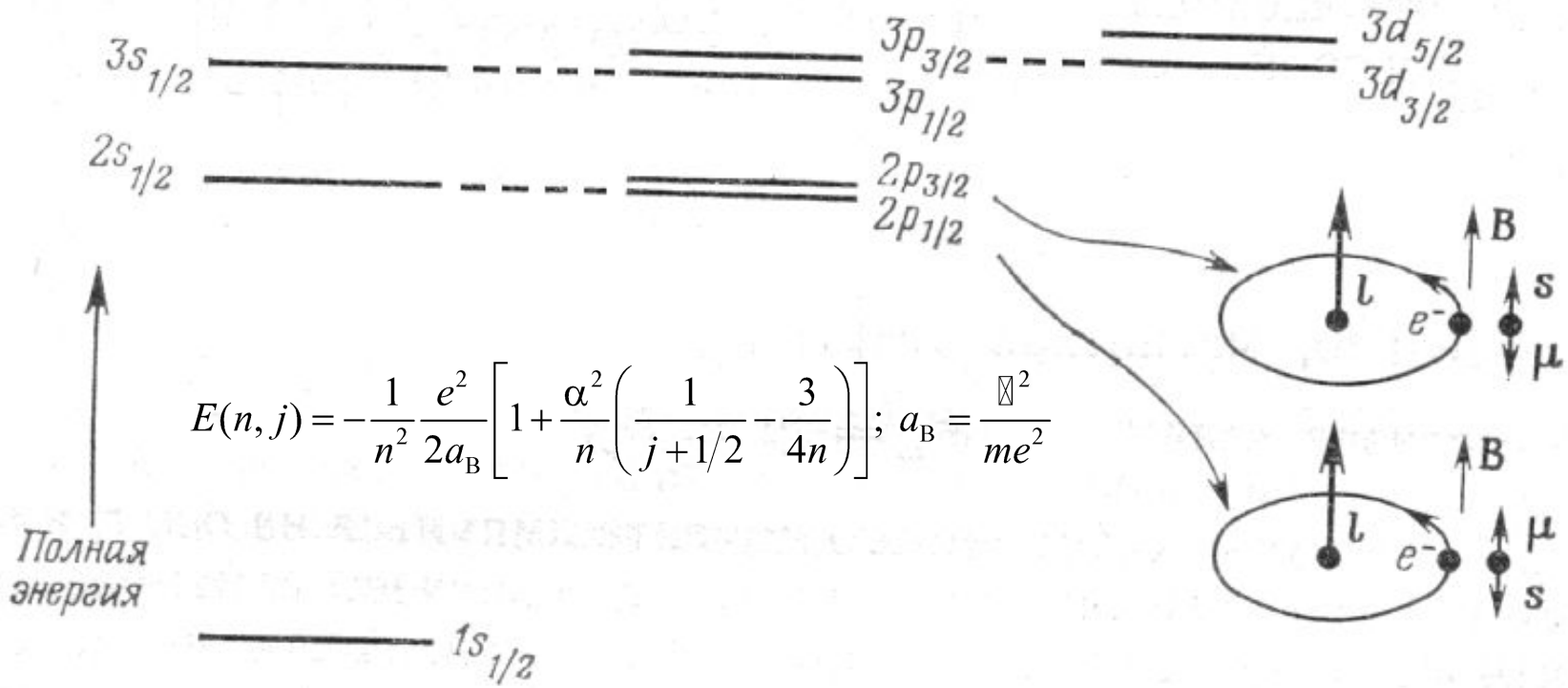
R – постоянная Ридберга, $hcR = 13.6$ эВ.



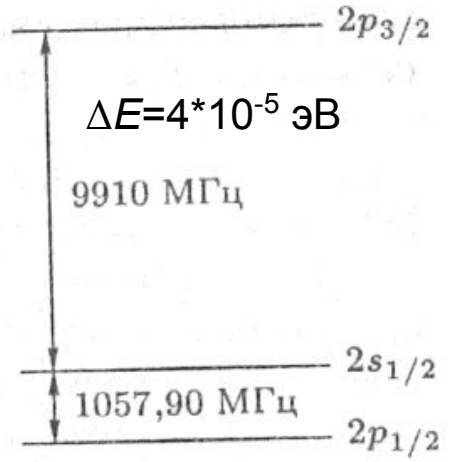
28

Схема образования дублетных линий главной и резкой серий натрия

Тонкая структура спектра атома водорода.



Лэмбовский сдвиг уровней



Сверхтонкая структура

