

АТОМНАЯ И ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА

УДК 539.184.26

СВЕРХТОНКАЯ СТРУКТУРА ВОДОРОДОПОДОБНОГО АТОМА, ОБУСЛОВЛЕННАЯ ОРБИТАЛЬНЫМ, СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ И СПИН-СПИНОВЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ

И. Е. Абрамов, А. В. Андреев

(кафедра общей физики и волновых процессов)

E-mail: av_andreev@phys.msu.ru

Рассматривается нерелятивистская модель водородоподобного атома, и на ее основе вычисляются поправки к энергетическому спектру атома. В основу анализа положен гамильтониан, учитывающий внутриатомные поля, создаваемые электроном и ядром.

Введение

В последнее десятилетие резко возросла точность измерения длин волн и частот атомных переходов [1, 2], что послужило очень мощным стимулом для развития теории спектральных линий водородоподобного атома. Традиционный подход [3] состоит в том, что водородоподобный атом рассматривается как электрон, находящийся в центральном электрическом поле неподвижного и точечного ядра, и на основе уравнения Дирака по теории возмущений производится расчет поправок, учитывающих движение и конечность размеров ядра, существование у ядра магнитного момента, а также радиационных поправок, обусловленных квантованием электромагнитного поля излучения. Развивая традиционный подход, в настоящее время проводится учет поправок, составляющих несколько герц [2, 4–6]. Тем не менее возможны и альтернативные подходы к теории атомных спектров, состоящие в поиске путей усовершенствования теории Дирака. В работе [7] предлагается новое калибровочно и релятивистски инвариантное действие. В настоящей статье рассматривается нерелятивистское приближение гамильтониана, следующее из вышеупомянутого действия. Задача о водородоподобном атоме формулируется как задача для замкнутой системы двух частиц с полуцелым спином, взаимодействующих посредством электромагнитного поля. Настоящая статья посвящена расчету сверхтонкой структуры водородоподобного атома, обусловленной орбитальным, спин-орбитальным и спин-спиновым взаимодействиями.

В системе покоя атома гамильтониан водородоподобного атома имеет вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_r} \Delta - \frac{Ze^2}{r} - \frac{4\mu_B\mu_N}{r^3} \mathbf{l}^2 + \frac{4\mu_B\mu_N}{r^3} (\gamma_e \mathbf{s}_e + \gamma_n \mathbf{s}_n) \mathbf{l} + \frac{4\mu_B\mu_N \gamma_e \gamma_n}{r^3} (3(\mathbf{s}_e \mathbf{n})(\mathbf{s}_n \mathbf{n}) - \mathbf{s}_e \mathbf{s}_n), \quad (1)$$

где $\hbar = h/2\pi$ — постоянная Планка, Δ — оператор Лапласа, а также использованы следующие обозначения:

$$m_r = \frac{m_e m_n}{m_e + m_n}, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad \hbar \mathbf{l} = [\mathbf{r} \times (-i\hbar \nabla)].$$

Приведенная масса электрона m_r выражена через m_n — массу ядра и m_e — массу электрона; e — модуль заряда электрона, Ze — заряд ядра. Вектор \mathbf{r} — разность между радиус-векторами электрона и ядра; \mathbf{l} — оператор орбитального момента системы; $\mathbf{s}_{e(n)}$ — оператор спина электрона (ядра). Гиромагнитный множитель электрона (ядра) обозначен как $\gamma_{e(n)}$, а магнетон Бора μ_B и ядерный магнетон μ_N определяются выражениями

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e c}, \quad \mu_N = \frac{Z|e|\hbar}{2m_n c}.$$

Гамильтониан (1) можно разбить на четыре смысловых слагаемых:

- 1) первые два слагаемых совпадают с гамильтонианом водородоподобного атома для уравнения Шрёдингера;
- 2) третье слагаемое описывает взаимодействие орбитальных токов электрона и ядра;
- 3) четвертое слагаемое ответственно за спин-орбитальное взаимодействие частиц. Необходимо заметить, что здесь термин «спин-орбитальное» взаимодействие трактуется более широко, поскольку описывает взаимодействие спина ядра и электрона с орбитальным моментом атома, а не взаимодействием спина и орбитального момента электрона как обычно;
- 4) последнее слагаемое есть гамильтониан спин-спинового взаимодействия.

Постановка задачи

Будем рассматривать стационарную задачу

$$H\Psi = E\Psi. \quad (2)$$

Волновая функция $\Psi(\mathbf{r})$ в (2) является спинором второго ранга, т. е. четырехкомпонентным столбцом, из-за того, что является прямым произведением спинорных волновых функций электрона и ядра. Как известно, произведение двух спиноров распадается на два неприводимых представления, соответствующие частице со спином нуль и со спином единица. Нетрудно проверить, что гамильтониан коммутирует с оператором полного углового момента атома. Используем формулы разложения волновых функций [8] для системы, состоящей из двух частиц, при заданной величине полного углового момента j и его проекции m . Тогда решение уравнения (2) имеет вид

$$\Psi_{jm}(\mathbf{r}) = f(r)\Omega_{j,l=j,m}^{(0)}(\theta, \varphi) + \sum_{\sigma=-1}^1 g_{\sigma}(r)\Omega_{j,l=j-\sigma,m}^{(1)}(\theta, \varphi), \quad (3)$$

где $\Omega_{j,l,m}^{(0)}(\theta, \varphi)$ — шаровые биспиноры.

Для решения (2) введем безразмерную энергию E' и радиус-вектор x :

$$E = \frac{\hbar^2 E'}{2m_r a_B^2}, \quad x = \frac{r}{a_B},$$

где боровский радиус $a_B = \hbar^2/m_r e^2$ определен через приведенную массу электрона.

Подставляя (3) в уравнение (2) и усредняя его по угловым переменным, получим уравнения для радиальных функций $f(r)$ и $g_{\sigma}(r)$. Уравнения разбиваются на две системы уравнений, так как гамильтониан спин-орбитального взаимодействия связывает лишь состояния с нулевой проекцией спина, а гамильтониан спин-спинового взаимодействия — лишь состояния с ненулевой проекцией спина. Для состояний с нулевой проекцией спина

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 f}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{df}{dx} + \left(E + \frac{2Z}{x} - \frac{j(j+1)}{x^2} \right) f = \\ & = -\frac{\beta}{x^3} \left[2j(j+1)f - \sqrt{j(j+1)}(\gamma_e - \gamma_n)g_0 \right], \\ & \frac{d^2 g_0}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dg_0}{dx} + \left(E + \frac{2Z}{x} - \frac{j(j+1)}{x^2} \right) g_0 = \\ & = -\frac{\beta}{x^3} \left[(2j(j+1) + \gamma_e + \gamma_n - \gamma_e \gamma_n)g_0 - \right. \\ & \quad \left. - \sqrt{j(j+1)}(\gamma_e - \gamma_n)f \right] \end{aligned} \quad (4)$$

и для состояний с ненулевой проекцией спина

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 g_1}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dg_1}{dx} + \left(E + \frac{2Z}{x} - \frac{j(j-1)}{x^2} \right) g_1 = \\ & = -\frac{\beta}{x^3} \left[\left(2j(j-1) - (\gamma_e + \gamma_n)(j-1) + \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \gamma_e \gamma_n \frac{j-1}{2j+1} \right) g_1 - 3\gamma_e \gamma_n \frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} g_{-1} \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 g_{-1}}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dg_{-1}}{dx} + \left(E + \frac{2Z}{x} - \frac{(j+1)(j+2)}{x^2} \right) g_{-1} = \\ & = -\frac{\beta}{x^3} \left[\left(2(j+1)(j+2) + (\gamma_e + \gamma_n)(j+2) + \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \gamma_e \gamma_n \frac{j+2}{2j+1} \right) g_{-1} - 3\gamma_e \gamma_n \frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} g_1 \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

В (4) и (5) введено обозначение

$$\beta = Z\alpha^2 \frac{m_r}{m_e + m_n}, \quad (6)$$

где α — постоянная тонкой структуры.

Систематика состояний водородоподобного атома

Поскольку аналитическое решение этих уравнений неизвестно, будем использовать численные методы, а также теорию возмущений. Основанием для использования теории возмущений является малость параметра (6). В этом случае левые части уравнений (4) и (5), определяющие нулевое приближение задачи, зависят только от квантового числа l , поэтому удобно воспользоваться систематикой уровней, близкой к систематике энергетических уровней электрона в кулоновском поле. Состояние с полным угловым моментом, равным j ($\mathbf{j} = \mathbf{j}_e + \mathbf{j}_n$), орбитальным моментом $L = l$ и спином s обозначается следующим образом: $^{(2s+1)}L_j$. Связь между состояниями с различными j, s и $^{(2s+1)}L_j$ показана в табл. 1. Из нее и уравнений (4) и (5) видно, что спин-орбитальное взаимодействие приводит к связи n^1L_j - и n^3L_j -уровней, а спин-спиновое взаимодействие приводит к связи $n^3(L-1)_j$ - и $n^3(L+1)_j$ -уровней, где n и n' — главные квантовые числа.

Таблица 1
Состояния водородоподобного атома

j	s	
	$s = 0$	$s = 1$
$j = 0$	1S_0	3P_0
$j = 1$	1P_1	$^3S_1, ^3P_1, ^3D_1$
$j = 2$	1D_2	$^3P_2, ^3D_2, ^3F_2$
$j = 3$	1F_3	$^3D_3, ^3F_3, ^3G_3$

Однако из уравнений (4) и (5) следует, что если n и n' различаются, то поправка к сдвигу уровня оказывается второго порядка малости. Действительно, в рамках теории возмущений энергетические положения связанных уровней определяются выражением

$$\begin{aligned} E^{(1,2)} = & \frac{E_k + E_{k'} + \Delta E_k + \Delta E_{k'}}{2} \pm \\ & \pm \sqrt{\left(\frac{E_k - E_{k'} + \Delta E_k - \Delta E_{k'}}{2} \right)^2 + (\Delta E_{kk'})^2}, \end{aligned} \quad (7)$$

где k и k' — совокупность квантовых чисел.

При $|E_k - E_{k'}| \gg \Delta E_{kk'}$, где $\Delta E_{kk'}$ — матричный элемент от перекрестного слагаемого в (4) и (5), вклад от перекрестного слагаемого в сдвиг уровня оказывается равным $(\Delta E_{kk'})^2 / (E_k - E_{k'})$, и им можно пренебречь в первом порядке теории возмущений. При $n = n'$ перекрестные слагаемые в правой части уравнений (4) и (5) дают вклад в сдвиг уровней уже в первом порядке теории возмущений. Таким образом, в первом порядке теории возмущений в результате спин-орбитального взаимодействия связанными оказываются лишь синглетный и триплетный уровни с одинаковым l . Спин-спиновая связь триплетных уровней $l = j - 1$ и $l' = j + 1$ возникает лишь во втором порядке теории возмущений. Проведем расчет для состояний с нулевой проекцией спина. При $j > 0$ уровни являются связанными:

$$\begin{aligned} \Delta E(n^1J_j) &= -\beta \left(\frac{2Z}{n}\right)^3 \frac{1}{2(2j+1)}, \\ \Delta E(n^3J_j) &= -\beta \left(\frac{2Z}{n}\right)^3 \frac{2j(j+1) + \gamma_e + \gamma_n - \gamma_e\gamma_n}{4j(j+1)(2j+1)}, \\ \Delta E(n^1J_j \leftrightarrow n^3J_j) &= \beta \left(\frac{2Z}{n}\right)^3 \frac{\gamma_e - \gamma_n}{4(2j+1)\sqrt{j(j+1)}}, \end{aligned} \quad (8)$$

где в обозначении термина заменили символ L на символ J , поскольку в данном случае $l = j$.

Обсуждение результатов

Подставляя (8) в (7), найдем сдвиги связанных уровней $n^1J_j \leftrightarrow n^3J_j$. Результаты сдвига уровней энергии, рассчитанные по теории возмущений и численно, представлены в табл. 2. Численные расчеты проводились на основе метода конечных элементов. Как видно, значения, рассчитанные по теории возмущений и численно, практически совпадают, малые расхождения можно объяснить учетом только первого порядка теории возмущений. Нужно заметить, что поправки к уровню энергии отрицательные, что соответствует дополнительной энергии связи. Поэтому координата максимального значения

волновой функции, которая соответствует наиболее вероятному нахождению электрона, должна сместиться к нулю. Это можно видеть на рис. 1, где представлена разность радиальных нормированных волновых функций атома водорода для $n = 2, j = 1$, с учетом и без учета спин-орбитального взаимодействия.

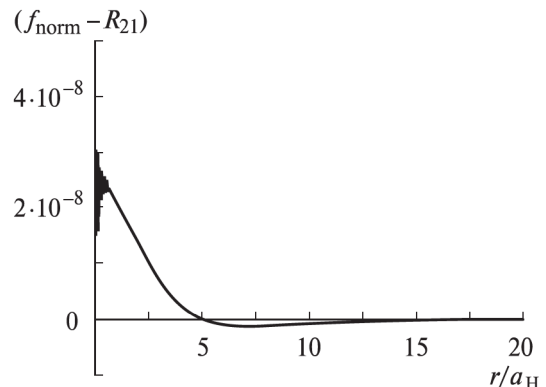


Рис. 1. Разность радиальных волновых функций атома водорода для $n = 2, j = 1$ с учетом и без учета спин-орбитального и спин-спиновой взаимодействий

На рис. 2 и 3 представлены радиальные волновые функции для двух различных состояний атома водорода с $n = 2, j = 1$. Эти состояния представляют смесь термов 2^1P_1 и 2^3P_1 . Для рис. 2,

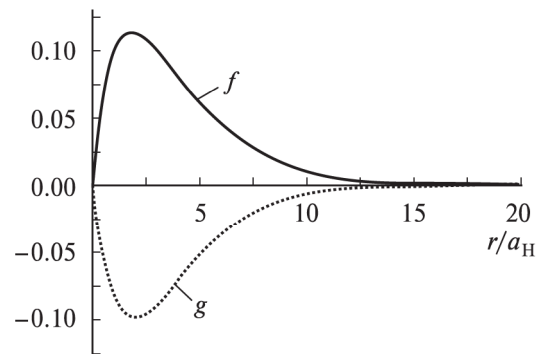


Рис. 2. Решение (4), соответствующее поправке $\delta E = -227 \cdot 10^{-11} R_y$ для $n = 2, j = 1$

Таблица 2

Сдвиги уровня энергии атомов водорода, рассчитанные с помощью теории возмущений и численно

n	Состояние атома водорода	Сдвиг уровня, рассчитанный с помощью теории возмущений (7) (в $10^{-11} R_y$)	Сдвиг уровня, рассчитанный численно для уравнения (4) (в $10^{-11} R_y$)
2	$0.772 \cdot \{2^1P_1\} - 0.635 \cdot \{2^3P_1\}$	-212	-227 ± 22
	$0.635 \cdot \{2^1P_1\} + 0.772 \cdot \{2^3P_1\}$	-871	-850 ± 22
3	$0.772 \cdot \{3^1P_1\} - 0.635 \cdot \{3^3P_1\}$	-63	-73 ± 11
	$0.635 \cdot \{3^1P_1\} + 0.772 \cdot \{3^3P_1\}$	-258	-257 ± 23
4	$0.772 \cdot \{4^1P_1\} - 0.635 \cdot \{4^3P_1\}$	-27	-29.3 ± 0.6
	$0.635 \cdot \{4^1P_1\} + 0.772 \cdot \{4^3P_1\}$	-109	-107 ± 2
5	$0.772 \cdot \{5^1P_1\} - 0.635 \cdot \{5^3P_1\}$	-13.6	-14.9 ± 0.2
	$0.635 \cdot \{5^1P_1\} + 0.772 \cdot \{5^3P_1\}$	-55.7	-54.9 ± 0.9

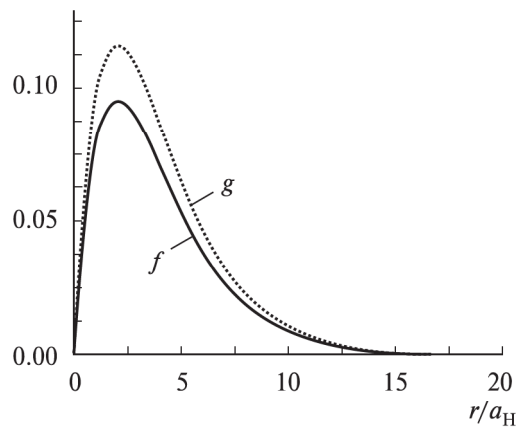


Рис. 3. Решение (4), соответствующее поправке $\delta E = -850 \cdot 10^{-11} R_y$ для $n=2, j=1$

соответствующего $\delta E = -227 \cdot 10^{-11} R_y$, это состояние $(0.772 \cdot \{2^1 P_1\} - 0.635 \cdot \{2^3 P_1\})$; для рис. 3, соответствующего $\delta E = -850 \cdot 10^{-11} R_y$, — состояние $(0.635 \cdot \{2^1 P_1\} + 0.772 \cdot \{2^3 P_1\})$.

Заключение

Рассчитанные поправки не совпадают с экспериментальными данными, потому что за основу был взят нерелятивистский гамильтониан. Совпадение результатов между численными и аналитическими расчетами позволяет оптимистично смотреть

на использование метода конечных элементов для дальнейшего расчета систем уравнений, подобных (4) и (5), которые возникнут для релятивистского гамильтониана и будут сопряжены с трудностями аналитического исследования.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант 05-02-16764).

Литература

1. Niering M., Holzwarth R., Reichert J. et al. // Phys. Rev. Lett. 2000. **84**, N 24. P. 5496.
2. De Beauvoir B., Schwob C., Azef O. // Eur. Phys. J. 2000. **D12**. P. 61.
3. Бете Г., Солнтер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М., 1960.
4. Eides M.I., Grotch H., Shelyuto V.A. // Phys. Rep. 2001. **342**. P. 63.
5. Mohr P.J., Taylor B.N. // Rev. Mod. Phys. 2000. **72**. P. 351.
6. Jentshura U.D., Mohr P.J., Soff G. // Phys. Rev. Lett. 1999. **82**. P. 53.
7. Andreev A.V. Atomic Spectroscopy: Introduction to the theory of hyperfine structure. Springer, 2006.
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М., 1989.

Поступила в редакцию
30.04.06