

## ПРИМЕНЕНИЕ НОВОГО ФОРМАЛИЗМА К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ ОБ ОДНОЭЛЕКТРОННОМ АТОМЕ

*Д. В. Гламазда*

Уральский государственный университет, Екатеринбург, Россия

Предлагается новый релятивистский формализм однокомпонентных волновых функций, пригодный для описания полей с произвольным спином. Его работоспособность демонстрируется на решении задач о нахождении энергетических термов водородоподобных атомов с различной степенью точности и в разных обстоятельствах: грубое решение, релятивистская поправка, тонкая структура, эффекты Зеемана в магнитном поле, сверхтонкое расщепление с учетом спина ядра.

New relativistic method of one-component wave functions applicable to description of fields with arbitrary spins is suggested. The method is used for the problem of energy states of hydrogen-like atoms depending on required accuracy and under different conditions: rough estimate, relativistic correction, fine structure, Zeeman effect in a magnetic field, hyperfine splitting with account of nucleus spin.

PACS: 31.15.-p

### ВВЕДЕНИЕ

Для решения задач атомной физики и физики элементарных частиц в настоящее время обычно пользуются либо методами нерелятивистской квантовой механики, либо релятивистской квантовой теории поля. Между тем разработан новый *релятивистский* формализм, не уступающий им в универсальности, но превосходящий простотой и наглядностью. Автор назвал его *формализмом однокомпонентных волновых функций*.

Новый аппарат основан на использовании скалярных волновых функций для описания полей с произвольным спином. Подробно его физические основы описаны в [1]. Здесь только отметим, что основополагающей для него является концепция *полей движения*, рассматривающая все без исключения материальные образования и их относительные движения как непрерывные поля распределенных в пространстве-времени заряда, энергии, импульса, углового момента и т. п. Неотъемлемым свойством таких полей является их самосогласованность или взаимная согласованность, что проще всего реализуется в *волновых полях*<sup>1</sup>.

Опишем вкратце основные характерные черты нового формализма. Во-первых, *все* фигурирующие в нем волновые функции (поля) являются скалярными комплексными. Во-вторых, если какое-то поле движения  $\Psi$  является суперпозицией нескольких *независимых*

---

<sup>1</sup>Отсутствие самосогласованности ведет к быстрой диссипации поля.

полей движения  $\psi, \phi, \chi, \dots$ <sup>1</sup>, то оно представляется в виде обычного произведения  $\Psi = \psi\phi\chi \dots$ . В-третьих, как и в квантовой механике, физическим величинам сопоставляются операторы. При действии оператора на поле  $\Psi$  он должен поочередно действовать на все парциальные поля, входящие в  $\Psi$ . При этом он должен быть выражен в переменных той же системы отсчета, что и поле, на которое он действует. В-четвертых, динамика произвольного поля  $\Psi$  описывается уравнением Клейна–Гордона–Фока

$$\partial_\mu \partial^\mu \Psi + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \Psi = 0, \quad \mu = 0, 1, 2, 3, \quad (1)$$

которое, таким образом, является универсальным для формализма.

Описание взаимодействия выполняется в том же характерном ключе. Если известно, что есть внешнее воздействие, то в общее поле  $\Psi$  вводится дополнительное парциальное поле движения  $f$ , называемое *полем реакции* (полем отклика). Поле  $\Psi$  подставляется в (1). Далее многое зависит от результата действия операторов на поле реакции. Приведем данные для электромагнитного взаимодействия. Если исследуемое поле движения  $\Psi$  обладает электрическим зарядом  $Q$  и на него со стороны действует 4-потенциал  $A^\mu$ , то результатом действия оператора 4-импульса будет

$$\hat{p}^\mu f = -\frac{Q}{c} A^\mu f \quad \longrightarrow \quad \partial^\mu f = \frac{iQ}{\hbar c} A^\mu f. \quad (2)$$

Вследствие (2) поле реакции  $f$  в дальнейшем сокращается в уравнении (1) и оставляет в нем собственные значения операторов, производных от  $\hat{p}^\mu$ .

Описание спина также не выходит за рамки вышеизложенного подхода. А именно, независимая степень свободы квантового поля — спин — полагается *независимым полем вращательного движения* в собственной системе отсчета<sup>2</sup>, и ему просто сопоставляется парциальное поле  $\sigma$ , входящее в  $\Psi$ . В квантовой теории вращательное движение должно описываться собственными функциями оператора момента импульса (и/или его квадрата). Поэтому  $\sigma$  изначально выбирается из этого класса. Наиболее общим выражением для него является

$$\sigma(\theta, \varphi) = Y_\nu^\mu(\theta, \varphi) = [a_p P_\nu^\mu(\cos \theta) + a_q Q_\nu^\mu(\cos \theta)] e^{i\mu\varphi}, \quad (3)$$

где  $P_\nu^\mu(\zeta)$ ,  $Q_\nu^\mu(\zeta)$  — присоединенные функции Лежандра 1-го и 2-го рода соответственно;  $a_p, a_q$  — числовые множители;  $\nu$  — квантовое число модуля углового момента;  $\mu$  — квантовое число  $z$ -проекции углового момента. Для целых  $\nu = l$ ,  $\mu = m$  функция  $Q_l^m(\cos \theta)$  имеет особенности, поэтому полагают  $a_q = 0$  и получают

$$\sigma(\theta, \varphi) = Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2l+1}{\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (4)$$

где  $P_l^{|m|}(\cos \theta)$  — присоединенные полиномы Лежандра. Такой вариант, в частности, имеет место при традиционном описании орбитального углового момента.

<sup>1</sup> Называемых *парциальными*.

<sup>2</sup> Совмещенной с центром масс поля.

При полужелтых  $\nu = s$ ,  $\mu = s'$  в полюсах сферической системы координат  $\theta$ ,  $\varphi$  обе функции  $P_s^{s'}(\cos \theta)$ ,  $Q_s^{s'}(\cos \theta)$  могут иметь сингулярности, однако всегда попеременно. Поэтому поле спина  $\sigma(\theta, \varphi)$  всегда может быть выбрано гладким с помощью соответствующего подбора множителей  $a_p$ ,  $a_q$ . Для важного случая  $s = 1/2$ ,  $s' = \pm 1/2$

$$Y_{1/2}^{1/2}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\pi} \left( \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \end{Bmatrix} \frac{\cos \theta}{\sqrt{\sin \theta}} + \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \end{Bmatrix} \sqrt{\sin \theta} \right) e^{i\varphi/2}, \quad (5)$$

$$Y_{1/2}^{-1/2}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\pi} \left( \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \end{Bmatrix} \frac{\cos \theta}{\sqrt{\sin \theta}} + \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \end{Bmatrix} \sqrt{\sin \theta} \right) e^{-i\varphi/2}. \quad (6)$$

Первую проверку формализм однокомпонентных волновых функций прошел на задачах о водородоподобном атоме. При этом выявились многие его преимущества перед традиционными методами. К ним относятся общая для всех задач последовательность основных действий (так, все задачи начинаются с записи уравнения Клейна–Гордона–Фока), простота, изначально релятивистский характер и наличие физической трактовки. Ниже будет продемонстрирована работа нового формализма.

Итак, рассмотрим атом, состоящий из ядра с зарядом  $+Ze$ , массой  $m_Z$  и одного электрона с зарядом  $-e$ , массой  $m_e$ . Если смотреть на него из некоторой внешней (лабораторной) системы отсчета (рис. 1), то вектор  $\mathbf{r}'_Z$  задает координаты ядра, а вектор  $\mathbf{r}'_e$  — координаты электрона<sup>1</sup>. Вектор  $\mathbf{R}$  указывает на центр масс (центр инерции) системы «ядро-электрон». Если перейти в систему центра масс (СЦИ) атома, то  $\mathbf{r}_Z$  задаст координаты ядра, а  $\mathbf{r}_e$  — координаты электрона. Можно показать, что такое рассмотрение эквивалентно задаче о движении некоторого «приведенного» электрона с координатами  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_Z$  в системе отсчета, совмещенной с ядром. Масса приведенного электрона при этом есть  $\tilde{m}$ .

Достоинством оператора д'Аламбера  $\partial_\mu \partial^\mu$  является его релятивистская инвариантность, благодаря которой уравнение (1) и в приведенной системе отсчета сохранит свою

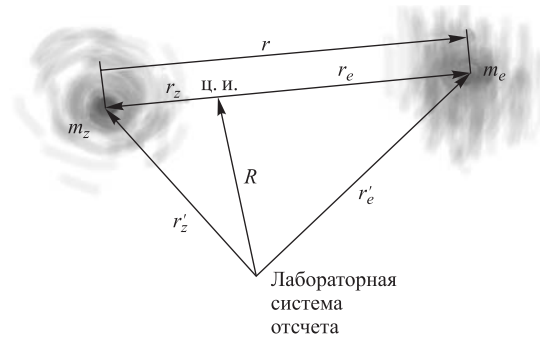


Рис. 1. Лабораторная система отсчета и система центра инерции (СЦИ) водородоподобного атома

<sup>1</sup>Для удобства мы сохраняем старую терминологию, хотя в рамках нового подхода правильнее было бы говорить «координаты центра масс ядра» и «координаты центра масс электрона». При этом под ядром и электроном подразумевались бы некоторые поля движения.

форму. В результате для поля движения  $\Psi$  приведенного электрона с массой  $\bar{m}$  будем иметь

$$\partial_\mu \partial^\mu \Psi + \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} \Psi = 0. \quad (7)$$

### 1. ГРУБОЕ ОПИСАНИЕ ТЕРМОВ ЭНЕРГИИ АТОМА

Считаем, что в атоме имеет место только орбитальное движение электрона под действием кулоновского взаимодействия с ядром. Поэтому представим волновую функцию «приведенного электрона» в виде

$$\Psi(x^\mu) = \psi(x^\mu) f(x^\mu), \quad (8)$$

где  $f(x^\mu)$  — поле реакции «приведенного электрона» на потенциал ядра;  $\psi(x^\mu)$  — искомая волновая функция (орбитального движения).

Подставим ее в уравнение движения (7) и выполним требуемые действия (дифференцирование произведения):

$$\begin{aligned} \partial_\mu \partial^\mu (\psi f) + \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} \psi f = 0, \quad \partial_\mu (\psi \partial^\mu f + f \partial^\mu \psi) + \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} \psi f = 0; \\ \psi \partial_\mu \partial^\mu f + f \partial_\mu \partial^\mu \psi + 2(\partial_\mu \psi)(\partial^\mu f) + \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} \psi f = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Поскольку поле ядра кулоновское, то его 4-потенциал

$$A^\mu = \left( \frac{Ze}{r}, 0, 0, 0 \right).$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} 2(\partial_\mu \psi)(\partial^\mu f) = -2 \frac{ie}{\hbar c} f A^\mu \partial_\mu \psi = -2 \frac{iZe^2}{\hbar c^2 r} \frac{\partial \psi}{\partial t} f; \\ \partial_\mu \partial^\mu f = \frac{iQ}{\hbar c} A^\mu (\partial_\mu f) = -\frac{Z^2 e^4}{\hbar^2 c^2 r^2} f. \end{aligned} \quad (10)$$

Используя эти результаты и *постоянную тонкой структуры*  $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$ , приведем уравнение динамики (9) к виду

$$-\frac{\alpha^2 Z^2}{r^2} \psi f + f \partial_\mu \partial^\mu \psi - 2 \frac{i\alpha Z}{cr} \frac{\partial \psi}{\partial t} f + \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} \psi f = 0.$$

Сократим на  $f$ , перегруппируем и запишем в 3-мерной форме:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \Delta \psi - 2 \frac{i\alpha Z}{cr} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \left( \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} - \frac{\alpha^2 Z^2}{r^2} \right) \psi = 0. \quad (11)$$

Считаем поле  $\Psi$  стационарным и поэтому полагаем  $\psi(t, \mathbf{r}) = e^{-i\omega t} \chi(\mathbf{r})$ . Если мы подставим это в уравнение (11), то получим

$$\Delta \chi + \left( -\frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} + \frac{\omega^2}{c^2} + 2 \frac{\alpha \omega Z}{cr} + \frac{\alpha^2 Z^2}{r^2} \right) \chi = 0.$$

Сумма первых двух членов в скобках отрицательна, так что

$$\Delta\chi + \left(-\kappa^2 + 2\frac{\alpha\omega Z}{cr} + \frac{\alpha^2 Z^2}{r^2}\right)\chi = 0, \quad \text{где} \quad -\kappa^2 = -\frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} + \frac{\omega^2}{c^2}.$$

В сферических координатах  $r, \theta, \varphi$  это уравнение запишется как

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \chi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi} \chi + \left(-\kappa^2 + 2\frac{\alpha\omega Z}{cr} + \frac{\alpha^2 Z^2}{r^2}\right)\chi = 0, \quad (12)$$

где угловая часть оператора Лапласа есть

$$\Delta_{\theta, \varphi} \equiv \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \text{ctg } \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

Разделим переменные  $r$  и  $\theta, \varphi$ , для чего положим  $\chi(\mathbf{r}) = R(r)Y(\theta, \varphi)$ . Получим

$$Y \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2Y}{r} \frac{\partial R}{\partial r} + \frac{R}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi} Y + \left(-\kappa^2 + 2\frac{\alpha\omega Z}{cr} + \frac{\alpha^2 Z^2}{r^2}\right) RY = 0,$$

откуда следуют два независимых уравнения:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left(-\kappa^2 + 2\frac{\alpha\omega Z}{cr} + \frac{\alpha^2 Z^2 - \lambda_1}{r^2}\right) R = 0, \quad \Delta_{\theta, \varphi} Y + \lambda_1 Y = 0.$$

Собственные функции оператора  $\Delta_{\theta, \varphi}$  те же, что и у оператора квадрата углового момента, т. е.

$$Y(\theta, \varphi) = [a_p P_l^m(\cos \theta) + a_q Q_l^m(\cos \theta)] e^{im\varphi},$$

где индексы  $l$  и  $m$  в данном случае являются квантовыми числами орбитального углового момента и принимают целочисленные значения. Кроме того, при этом  $\lambda_1 = l(l+1)$ , что мы и подставим в радиальное уравнение:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[-\kappa^2 + 2\frac{\alpha\omega Z}{cr} - \frac{l(l+1) - \alpha^2 Z^2}{r^2}\right] R = 0. \quad (13)$$

Решение подобного уравнения (только без *релятивистской поправки*  $\alpha^2 Z^2 / r^2$ ) можно найти почти в каждом учебнике квантовой механики [2–6]. Обычно полагают  $R(r) = r^\gamma e^{-\kappa r} W(r)$ , где  $\gamma$  — некоторая произвольная пока константа,  $W$  — новая функция от  $r$ , вид которой предстоит найти. После этого (13) превращается в уравнение для  $W(r)$  со свободным параметром  $\gamma$ . Чтобы его упростить, принимают

$$\gamma^2 + \gamma + \alpha^2 Z^2 - l(l+1) = 0, \quad \longrightarrow \quad \gamma = -\frac{1}{2} + \sqrt{(l+1/2)^2 - \alpha^2 Z^2}, \quad (14)$$

после чего получают

$$r \frac{d^2 W}{dr^2} + 2(\gamma - \kappa r + 1) \frac{dW}{dr} + 2 \left( \frac{\alpha\omega Z}{c} - \kappa\gamma - \kappa \right) W = 0.$$

Полагая  $W(r)$  в виде ряда  $W = W(\xi) = \sum a_k \xi^k$ , где  $\xi = 2\kappa r$ , получают рекуррентную формулу для его коэффициентов:

$$a_{k+1} = \frac{k + \gamma + 1 - \frac{\alpha\omega Z}{\kappa c}}{(k+1)(k+2\gamma+2)} a_k.$$

Для сходимости этот ряд должен обрываться при некотором  $k = n_r$ , из чего следует

$$\frac{\alpha\omega Z}{\kappa c} = n_r + \gamma + 1.$$

Возводя это выражение в квадрат:

$$\frac{\alpha^2\omega^2 Z^2}{\kappa^2 c^2} = (n_r + \gamma + 1)^2 = n_r^2 + \gamma^2 + 1 + 2n_r\gamma + 2\gamma + 2n_r,$$

подставляя сюда  $\gamma$  из (14) и ограничиваясь членами степени не выше  $\alpha^2$ , получим

$$\frac{\alpha^2\omega^2 Z^2}{\kappa^2 c^2} = n^2 - \alpha^2 Z^2 \frac{n}{l+1/2},$$

где главное квантовое число  $n = n_r + l + 1$ . Отсюда уже следует окончательное выражение для энергетических термов, причем сразу с релятивистской поправкой:

$$E_{n,l} = \hbar\omega \approx \bar{m}c^2 - \frac{\bar{m}c^2}{2} \left[ \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} + \frac{\alpha^4 Z^4}{n^3} \left( \frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right]. \quad (15)$$

## 2. ТОНКАЯ СТРУКТУРА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ТЕРМОВ

Реальный электрон обладает еще одним, собственным, полем движения, которое принято называть спином. Это независимое поле, а потому в общую волновую функцию входит в виде произведения:

$$\Psi = \psi f \sigma.$$

Здесь  $\psi$  и  $f$  есть соответственно поле орбитального движения и поле реакции на взаимодействие. Спиновое поле  $\sigma = \sigma(x''^{\mu})$  зависит от «внутренних» координат  $x''^{\mu}$  собственной системы отсчета электрона.

Подставим волновую функцию в динамическое уравнение:

$$\partial_{\mu} \partial^{\mu} (\psi f \sigma) + \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} \psi f \sigma = 0.$$

Раскроем скобки и после приведения подобных получим

$$\begin{aligned} & (\partial_{\mu} \partial^{\mu} \psi) f \sigma + (\partial_{\mu} \partial^{\mu} f) \psi \sigma + (\partial_{\mu} \partial^{\mu} \sigma) \psi f + 2(\partial_{\mu} \psi)(\partial^{\mu} f) \sigma + \\ & + 2(\partial_{\mu} \psi)(\partial^{\mu} \sigma) f + 2(\partial_{\mu} f)(\partial^{\mu} \sigma) \psi + \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} \psi f \sigma = 0. \quad (16) \end{aligned}$$

Первые три слагаемых описывают энергию-импульс полей  $\psi$ ,  $f$  и  $\sigma$  по отдельности, три следующих характеризуют попарное взаимодействие входящих в них полей:

$$\begin{aligned} 2(\partial_\mu \psi)(\partial^\mu f)\sigma & \text{— взаимодействие электрона с ядром,} \\ 2(\partial_\mu \psi)(\partial^\mu \sigma)f & \text{— спин-орбитальное взаимодействие электрона,} \\ 2(\partial_\mu f)(\partial^\mu \sigma)\psi & \text{— взаимодействие спина электрона с ядром.} \end{aligned}$$

Последним из них пренебрежем на данном этапе вследствие относительной малости. Воспользуемся соотношениями (10), после чего из (16) получим:

$$\partial_\mu \partial^\mu \psi - 2 \frac{i\alpha Z}{cr} \frac{\partial \psi}{\partial t} + 2(\partial_\mu \psi) \frac{\partial^\mu \sigma}{\sigma} + \left[ \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} - \frac{\alpha^2 Z^2}{r^2} + \frac{\partial_\mu \partial^\mu \sigma}{\sigma} \right] \psi = 0. \quad (17)$$

Спиновая функция  $\sigma$  зависит только от углов  $\theta''$ ,  $\varphi''$  и не зависит от  $r''$ . Это значит, что без нарушения общности для этой функции начала отсчета двух систем  $x^\mu$  и  $x''^\mu$  можно совместить. Таким образом, в функции  $\sigma(\theta'', \varphi'')$  мы можем совершить замену  $\theta'' = \theta$ ,  $\varphi'' = \varphi$ , после чего полагать  $\sigma = \sigma(\theta, \varphi)$ .

Получим

$$\partial_\mu \partial^\mu \sigma = \frac{s(s+1)}{r^2} \sigma \longrightarrow \frac{\partial_\mu \partial^\mu \sigma}{\sigma} = \frac{s(s+1)}{r^2}.$$

Можно показать [1], что

$$(\partial_\mu \psi)(\partial^\mu \sigma) = \frac{\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}}{r^2} \psi \sigma, \quad \mathbf{l} = \mathbf{L}/\hbar, \quad \mathbf{s} = \mathbf{S}/\hbar,$$

где  $\mathbf{L}$  — угловой момент поля движения  $\psi$  (орбитальный);  $\mathbf{S}$  — угловой момент поля движения  $\sigma$  (спин).

Поскольку  $\mathbf{l} \cdot \mathbf{s} = [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]/2$ , то уравнение (17) приобретет следующий вид<sup>1</sup>:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \Delta \psi - 2 \frac{i\alpha Z}{cr} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \left[ \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} - \frac{\alpha^2 Z^2}{r^2} + \frac{j(j+1) - l(l+1)}{r^2} \right] \psi = 0.$$

Подстановкой  $\psi = e^{-i\omega t} \chi(\mathbf{r})$  избавимся от временной зависимости и получим

$$\Delta \chi + \left[ -\kappa^2 + 2 \frac{\alpha\omega Z}{cr} + \frac{\alpha^2 Z^2}{r^2} - \frac{j(j+1) - l(l+1)}{r^2} \right] \chi = 0. \quad (18)$$

Разделяя переменные  $r$  и  $\theta, \varphi$ , мы получим еще одно слагаемое

$$-\frac{l(l+1)}{r^2} R,$$

которое взаимно уничтожится с противоположным в (18), после чего останется радиальное уравнение

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[ -\kappa^2 + 2 \frac{\alpha\omega Z}{cr} - \frac{j(j+1) - \alpha^2 Z^2}{r^2} \right] R = 0. \quad (19)$$

<sup>1</sup> $j$  есть модуль полного углового момента атома  $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ .

Оно с точностью до обозначений  $l \leftrightarrow j$  совпадает с уравнением (13), поэтому нет ничего удивительного в том, что из него для энергетических термов получается подобная формула

$$E_{n,l} = \hbar\omega \approx \bar{m}c^2 - \frac{\bar{m}c^2}{2} \left[ \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} + \frac{\alpha^4 Z^4}{n^3} \left( \frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right], \quad (20)$$

известная под названием формулы тонкой структуры<sup>1</sup>.

### 3. АТОМ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ. СЛОЖНЫЙ ЭФФЕКТ ЗЕЕМАНА

Влияние магнитного поля на вид спектров атомов известно под общим названием эффектов Зеемана (1896). В случае слабых полей различают простой (нормальный) и сложный (аномальный) эффекты Зеемана, возникающие при различной мультиплетности линий. В сильных полях имеет место эффект Пашена–Бака (1912).

Простой эффект Зеемана имеет место, в частности, тогда, когда спин излучающих электронов не участвует в явлении. Так может обстоять дело, если таких электронов два и спины их противоположно направлены. Следовательно, водородоподобные атомы, имеющие по определению один электрон, в слабых полях участвуют только в сложном эффекте Зеемана. Найдем формулу для энергетических уровней в этом случае.

Итак, волновая функция имеет теперь состав  $\Psi = \psi f \sigma f'$ , где  $\psi$  — поле орбитального движения,  $f$  — поле реакции электрона на ядро,  $\sigma$  — поле спинового движения,  $f'$  — поле реакции на внешнее магнитное поле  $\mathbf{H}$ .

Подставим это в уравнение динамики (1) и получим

$$\begin{aligned} & (\partial_\mu \partial^\mu \psi) f \sigma f' + (\partial_\mu \partial^\mu f) \psi \sigma f' + (\partial_\mu \partial^\mu \sigma) \psi f f' + (\partial_\mu \partial^\mu f') \psi f \sigma + \\ & + 2(\partial_\mu \psi)(\partial^\mu f) \sigma f' + 2(\partial_\mu \psi)(\partial^\mu \sigma) f f' + 2(\partial_\mu \psi)(\partial^\mu f') f \sigma + \\ & + 2(\partial_\mu f)(\partial^\mu \sigma) \psi f' + 2(\partial_\mu f)(\partial^\mu f') \psi \sigma + 2(\partial_\mu \sigma)(\partial^\mu f') \psi f + \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} \psi f \sigma f' = 0. \end{aligned} \quad (21)$$

Первые четыре члена описывают энергию-импульс собственно полей  $\psi$ ,  $f$ ,  $\sigma$ ,  $f'$ , следующие шесть — попарные взаимодействия этих полей между собой:

- $2(\partial_\mu \psi)(\partial^\mu f) \sigma f'$  — взаимодействие электрона с ядром,
- $2(\partial_\mu \psi)(\partial^\mu \sigma) f f'$  — спин-орбитальное взаимодействие электрона,
- $2(\partial_\mu \psi)(\partial^\mu f') f \sigma$  — взаимодействие орбитального движения с магнитным полем,
- $2(\partial_\mu f)(\partial^\mu \sigma) \psi f'$  — взаимодействие спина электрона с ядром,
- $2(\partial_\mu f)(\partial^\mu f') \psi \sigma$  — взаимодействие полей реакции  $f$ ,  $f'$ ,
- $2(\partial_\mu \sigma)(\partial^\mu f') \psi f$  — взаимодействие спина электрона с магнитным полем.

Из-за слабости магнитного поля отбрасываем 4-е и 9-е слагаемые. Поскольку поле ядра мы пока считаем чисто кулоновским, спин электрона с ним не взаимодействует. Поэтому отбрасываем и 8-е слагаемое.

<sup>1</sup>Без релятивистской части  $\bar{m}c^2$  ее получил эмпирическим путем А. Зоммерфельд (1916).



Магнитное поле  $\mathbf{H}$  задает в пространстве выделенное направление. Сориентируем нашу систему координат осью  $z$  вдоль напряженности  $\mathbf{H}$ , тогда 4-потенциал  $A'^{\mu}$  магнитного поля можно представить в виде

$$A'^{\mu} = \left( 0, -\frac{H}{2}y, \frac{H}{2}x, 0 \right), \quad H \equiv |\mathbf{H}| = \text{const.} \quad (22)$$

Действительно, при этом получим поле  $\mathbf{H}$ , ориентированное вдоль оси  $z$ :

$$\mathbf{H} = \text{rot}\mathbf{A}' = \nabla \times \mathbf{A}' = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ \partial/\partial x & \partial/\partial y & \partial/\partial z \\ -Hy/2 & Hx/2 & 0 \end{vmatrix} = 0 \cdot \mathbf{e}_x + 0 \cdot \mathbf{e}_y + H \cdot \mathbf{e}_z.$$

Далее, используя соотношения, полученные в предыдущих разделах для учета взаимодействия с ядром и т. п., перепишем уравнение (21) в следующем виде:

$$\begin{aligned} (\partial_{\mu}\partial^{\mu}\psi)f\sigma f' - \frac{\alpha^2 Z^2}{r^2}\psi f\sigma f' + \frac{s(s+1)}{r^2}\psi f\sigma f' - 2\frac{i\alpha Z}{cr}\frac{\partial\psi}{\partial t}f\sigma f' + 2\frac{\mathbf{l}\cdot\mathbf{s}}{r^2}\psi f\sigma f' + \\ + 2(\partial_{\mu}\psi)(\partial^{\mu}f')f\sigma + 2(\partial_{\mu}\sigma)(\partial^{\mu}f')\psi f + \frac{\tilde{m}^2 c^2}{\hbar^2}\psi f\sigma f' = 0. \end{aligned} \quad (23)$$

С учетом (2) и (22) находим, что

$$\partial^{\mu}f' = \frac{ie}{\hbar c} \left( 0, \frac{H}{2}y, -\frac{H}{2}x, 0 \right) f', \quad 2(\partial_{\mu}\psi)(\partial^{\mu}f')f\sigma = \frac{ieH}{\hbar c} \left( y\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial y} \right) f\sigma f'.$$

Вспомянув выражение для  $z$ -компоненты момента импульса поля  $\psi$

$$\hat{M}_z\psi = -i\hbar \left( x\frac{\partial\psi}{\partial y} - y\frac{\partial\psi}{\partial x} \right) = L_z\psi,$$

получаем

$$2(\partial_{\mu}\psi)(\partial^{\mu}f')f\sigma = \frac{e}{\hbar^2 c} L_z H \psi f\sigma f' \quad \longrightarrow \quad 2(\partial_{\mu}\psi)(\partial^{\mu}f')f\sigma = \frac{e}{\hbar c} (\mathbf{l}\cdot\mathbf{H})\psi f\sigma f'. \quad (24)$$

Здесь мы воспользовались также тем, что  $\mathbf{H}$  ориентировано вдоль оси  $z$  и на него умножается  $z$ -компонента углового момента, что эквивалентно скалярному произведению  $\mathbf{l}$  и  $\mathbf{H}$ .

Подобным образом выясним сущность 7-го слагаемого в (23):

$$2(\partial_{\mu}\sigma)(\partial^{\mu}f')\psi f = \frac{ieH}{\hbar c} \left( y\frac{\partial\sigma}{\partial x} - x\frac{\partial\sigma}{\partial y} \right) \psi f f' = -\frac{ieH}{\hbar c} \frac{\partial\sigma}{\partial\varphi} \psi f f'. \quad (25)$$

Поле спинового вращения электрона  $\sigma$  зависит только от углов  $\theta''$ ,  $\varphi''$  системы отсчета, связанной с центром масс электрона. Однако в предыдущем разделе мы убедились в том, что можно без нарушения общности полагать  $\theta'' \equiv \theta$ ,  $\varphi'' \equiv \varphi$ .

Отличие этого случая от предыдущего состоит в том, что магнитное поле, хотя и слабое, вызывает прецессию обеих систем отсчета вокруг осей  $z = z''$  (ларморова прецессия) с частотами  $\omega_l = eH/2m_e c$ ,  $\omega_s = eH/m_e c$  соответственно. То, что мы можем

совместить начала систем  $x^\mu$  и  $x''^\mu$ , очень важно. Это значит, что в обеих системах могут использоваться одни и те же часы<sup>1</sup>, т. е. что  $t \equiv t''$ . В [1] показано, что во вращающихся подобным образом системах отсчета релятивистский интервал сохраняется, так же как и в инерциальных системах отсчета.

Таким образом, СЦИ атома поворачивается синхронно с прецессией орбитального движения электрона, а совмещенная с нею ось  $z'' = z$  «спиновая система» — синхронно с прецессией спина. При этом

$$\frac{\partial r''}{\partial r} = 1, \quad \frac{\partial \theta''}{\partial \theta} = 1, \quad \frac{\partial \varphi''}{\partial \varphi} = \frac{d\varphi''}{d\varphi} = \frac{d\varphi''/dt''}{d\varphi/dt} = \frac{\omega_s}{\omega_l} = 2,$$

где мы воспользовались тем, что  $t = t''$ . Недиagonальные элементы матрицы Якоби преобразования  $x^\mu \leftrightarrow x''^\mu$  равны 0. Следовательно,

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \varphi} = \frac{\partial \sigma}{\partial r'} \frac{\partial r'}{\partial \varphi} + \frac{\partial \sigma}{\partial \theta'} \frac{\partial \theta'}{\partial \varphi} + \frac{\partial \sigma}{\partial \varphi'} \frac{\partial \varphi'}{\partial \varphi} = 2 \frac{\partial \sigma}{\partial \varphi'} = 2i \frac{S_z}{\hbar} \sigma = 2is' \sigma, \quad \text{где } s' \equiv \frac{S_z}{\hbar}.$$

Подставим это в (25), затем все — в уравнение (23), сократим на  $f\sigma f'$  и получим уравнение для поля  $\psi$ :

$$\partial_\mu \partial^\mu \psi - 2 \frac{i\alpha Z}{cr} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \left[ \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} + \frac{2\mathbf{l} \cdot \mathbf{s} + s(s+1) - \alpha^2 Z^2}{r^2} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{l} \cdot \mathbf{H} + 2 \frac{e}{\hbar c} \mathbf{s} \cdot \mathbf{H} \right] \psi = 0.$$

В трехмерном виде:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \Delta \psi - 2 \frac{i\alpha Z}{cr} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \left[ \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} + \frac{2\mathbf{l} \cdot \mathbf{s} + s(s+1) - \alpha^2 Z^2}{r^2} + \frac{e}{\hbar c} (\mathbf{l} + 2\mathbf{s}) \cdot \mathbf{H} \right] \psi = 0. \quad (26)$$

Решение этого уравнения выполняется по той же схеме, что и в предыдущих разделах. Поле  $\psi$  полагается стационарным, и это позволяет избавиться от временной зависимости. Затем при решении в сферических координатах производится разделение переменных  $r$  и  $\theta, \varphi$ . Соответственно получаются независимые уравнения для радиальной и угловой функций. На одном из этапов радиальное уравнение

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[ -\kappa_H^2 + 2 \frac{\alpha \omega Z}{cr} + \frac{\alpha^2 Z^2 - j(j+1)}{r^2} \right] R = 0$$

оказывается по форме идентичным уравнению (19), только

$$\kappa_H^2 = \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} - \frac{\omega^2}{c^2} + \frac{e}{\hbar c} (\mathbf{l} + 2\mathbf{s}) \cdot \mathbf{H}$$

отличается от  $\kappa^2$ . Поэтому формула для энергетического терма оказывается похожей на формулу тонкой структуры, отличаясь от нее лишь добавкой, зависящей от магнитного поля  $\mathbf{H}$ :

$$E = \hbar \omega \approx \bar{m} c^2 - \frac{\bar{m} c^2}{2} \left[ \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} + \frac{\alpha^4 Z^4}{n^3} \left( \frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right] + \frac{e \hbar}{2 \bar{m} c} (\mathbf{l} + 2\mathbf{s}) \cdot \mathbf{H}. \quad (27)$$

<sup>1</sup>Находящиеся, как обычно, в начале отсчета.

Вышеназванную добавку можно также представить в виде

$$E_{\mathbf{H}} = -g j' \mu_B H, \quad (28)$$

где  $g = \frac{3j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$  — множитель Ланде (g-фактор),  $j'$  —  $z$ -проекция полного момента  $\mathbf{j}$ , а  $\mu_B = e\hbar/2m_e c$  — магнетон Бора [7]. Важную роль при этом играет то обстоятельство, что вследствие слабости магнитного поля спин-орбитальная связь оказывается сильнее, чем взаимодействия  $\mathbf{l}$  и  $\mathbf{s}$  с  $\mathbf{H}$  по отдельности. Поэтому векторы  $\mathbf{l}$  и  $\mathbf{s}$  прецессируют вокруг  $\mathbf{j}$ , который, в свою очередь, медленно поворачивается в поле  $\mathbf{H}$  вокруг оси  $z$ . Усреднение по времени скалярных произведений  $(\mathbf{l} \cdot \mathbf{H})$  и  $(\mathbf{s} \cdot \mathbf{H})$  как раз и приводит к (28).

#### 4. ЭФФЕКТ ПАШЕНА–БАКА

В сильных магнитных полях спектральные линии расщепляются на три компоненты, и это явление носит название эффекта Пашена–Бака. Другое название этого явления — *магнитооптическое превращение* [3].

Теория эффекта Пашена–Бака выглядит подобно той, что была развита в предыдущем разделе. То же начальное уравнение динамики (1), тот же состав общего поля движения, те же развернутое уравнение (21) и 4-потенциал (22) внешнего магнитного поля. Далее начинаются различия. Так как поле  $\mathbf{H}$  сильное, векторы  $\mathbf{l}$  и  $\mathbf{s}$  уже не прецессируют вокруг  $\mathbf{j}$ , а сами являются сохраняющимися величинами<sup>1</sup>. Они прецессируют вокруг  $\mathbf{H}$  с ларморовыми частотами  $\omega_l$  и  $\omega_s$  соответственно. При этом эффекты, обусловленные магнитным полем, «забывают» действие всех сил и поправок, кроме кулоновского взаимодействия ядра и электрона. Поэтому в развернутом уравнении (21) следует оставить только 1-е, 5-е, 7-е, 10-е и 11-е слагаемые:

$$(\partial_\mu \partial^\mu \psi) f \sigma f' + 2(\partial_\mu \psi)(\partial^\mu f) \sigma f' + 2(\partial_\mu \psi)(\partial^\mu f') f \sigma + 2(\partial_\mu \sigma)(\partial^\mu f') \psi f + \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} \psi f \sigma f' = 0. \quad (29)$$

Дальнейший путь решения аналогичен пройденным в предыдущих разделах. Для радиальной волновой функции получается уравнение

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[ -\kappa_H^2 + 2 \frac{\alpha \omega Z}{cr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0, \quad \kappa_H^2 = \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} - \frac{\omega^2}{c^2} + \frac{e}{\hbar c} (\mathbf{l} + 2\mathbf{s}) \cdot \mathbf{H}.$$

Его решением является бальмеровский терм плюс  $\bar{m}c^2$  и добавка, зависящая от магнитного поля:

$$E = \hbar \omega \approx \bar{m}c^2 - \frac{\bar{m}c^2}{2} \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} + \frac{e\hbar}{2\bar{m}c} (\mathbf{l} + 2\mathbf{s}) \cdot \mathbf{H}. \quad (30)$$

Названная добавка формально совпадает с таковой же в (27). Однако, поскольку характер прецессии векторов  $\mathbf{l}$ ,  $\mathbf{s}$ ,  $\mathbf{j}$  теперь другой, усреднение по времени приводит к другому результату:

$$E_{\mathbf{H}} = -\mu_B (m + 2s') H.$$

Здесь  $m$  — азимутальное квантовое число орбитального момента импульса;  $s'$  — квантовое число  $z$ -проекции спина.

<sup>1</sup>Точнее, сохраняются их модули и  $z$ -проекции.

## 5. СВЕРХТОНКАЯ СТРУКТУРА ТЕРМОВ ЭНЕРГИИ

Одним из обязательных атрибутов фермионного поля является поле спина. Атомные ядра состоят из фермионов — протонов и нейтронов. В частности, ядро обычного водорода, состоящее из одного протона, имеет спин  $\hbar/2$ . Возникает вопрос: почему же до сих пор мы пренебрегали наличием спина ядра? Ответ заключается в малости магнитного момента ядра, связанного со спином. Магнитный момент электрона приблизительно равен магнетону Бора  $\mu_e \approx \mu_B = e\hbar/2m_e c$ , тогда как магнитный момент ядра есть величина порядка ядерного магнетона  $\mu_N = e\hbar/2m_p c$  [8]. Из сопоставления<sup>1</sup>  $\mu_N/\mu_B = m_e/m_p = 1/1836,1$  становится понятной причина незаметности вращательного поля ядра: в одном и том же магнитном поле  $\mathbf{H}$  энергия взаимодействия магнитного диполя ядра более чем на три порядка меньше, чем энергия взаимодействия магнитного диполя электрона. Следовательно, если ядро оказывает еще какое-то влияние на формирование спектра (кроме основного — кулоновского взаимодействия), то это влияние слабее, как минимум, в 1000 раз.

Теперь, однако, мы уже подошли к тому рубежу, на котором следует начать учитывать и такие слабые эффекты. Мы собираемся привлечь к описанию энергетических термов атома поля движения, связанные с вращением ядра, пользуясь при этом методикой формализма однокомпонентных волновых функций. Для этого введем следующие обозначения<sup>2</sup>:

- $\mathbf{I}$  — спин ядра в единицах  $\hbar$  (т. е. безразмерный),
- $I$  — квантовое число спина  $\mathbf{I}$  ядра,
- $\mathbf{F}$  — полный угловой момент атома (включая ядро) в единицах  $\hbar$ ,
- $F$  — квантовое число полного момента  $\mathbf{F}$ .

Общая волновая функция имеет состав  $\Psi = \psi f \sigma$ , где  $\psi(x^\mu)$  — поле орбитального движения электрона,  $f(x^\mu)$  — поле реакции электрона на воздействие ядра,  $\sigma(x''^\mu)$  — поле спинового движения электрона.

Подставим ее в уравнение (1) и получим

$$(\partial_\mu \partial^\mu \psi) f \sigma + (\partial_\mu \partial^\mu f) \psi \sigma + (\partial_\mu \partial^\mu \sigma) \psi f + \\ + 2(\partial_\mu \psi)(\partial^\mu f) \sigma + 2(\partial_\mu \psi)(\partial^\mu \sigma) f + 2(\partial_\mu f)(\partial^\mu \sigma) \psi + \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} \psi f \sigma = 0. \quad (31)$$

В этой задаче мы уже не можем пользоваться чисто кулоновским потенциалом ядра. Необходимо учесть магнитные и электрические мультипольные моменты следующих (после нулевого) порядков. Наиболее существенным из них является магнитный дипольный момент, тем более что у обычного водорода ядро — это единственный протон, не имеющий квадрупольного электрического момента. Пренебрегая всеми остальными моментами, запишем [10]

$$A^\mu = \left( \frac{Ze}{r}, \frac{\boldsymbol{\mu}_N \times \mathbf{r}}{r^3} \right) = \left( \frac{Ze}{r}, \mu_N g_N \frac{\mathbf{I} \times \mathbf{r}}{r^3} \right), \text{ где } g_N \text{ — множитель Ланде ядра.}$$

<sup>1</sup> $m_p$  — масса протона.

<sup>2</sup>В отличие от квантовых чисел электрона, квантовые числа ядра мы обозначим большими буквами (см. [6, 8, 9]).

Для второго члена в (31) находим:

$$(\partial_\mu \partial^\mu f)\psi\sigma = -\frac{e^2}{\hbar^2 c^2} A_\mu A^\mu \psi f\sigma = -\frac{e^2}{\hbar^2 c^2} \left[ \frac{Z^2 e^2}{r^2} - \mu_N^2 g_N^2 \frac{|\mathbf{I} \times \mathbf{r}|^2}{r^6} \right] \psi f\sigma.$$

Четвертое слагаемое есть

$$2(\partial_\mu \psi)(\partial^\mu f)\sigma = -2\frac{ie}{\hbar c} (\partial_\mu \psi) A^\mu f\sigma = \left[ -2\frac{i\alpha Z}{cr} \frac{\partial \psi}{\partial t} + 2\frac{\mu_N g_N e}{\hbar^2 c} \frac{(\hat{\mathbf{p}}\psi) \cdot (\mathbf{I} \times \mathbf{r})}{r^3} \right] f\sigma.$$

В [1] показано, что

$$(\hat{\mathbf{p}}\psi) \cdot (\mathbf{I} \times \mathbf{r}) = -\frac{\hbar}{r^2} [(\mathbf{r} \cdot \mathbf{I})(\mathbf{I} \cdot \mathbf{r}) - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{r})(\mathbf{I} \cdot \mathbf{I})]\psi = \hbar(\mathbf{I} \cdot \mathbf{I})\psi,$$

следовательно,

$$2(\partial_\mu \psi)(\partial^\mu f)\sigma = 2 \left[ -\frac{i\alpha Z}{cr} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\mu_N g_N e}{\hbar c} \frac{(\mathbf{I} \cdot \mathbf{I})}{r^3} \psi \right] f\sigma. \quad (32)$$

Шестое слагаемое для (31):

$$\begin{aligned} 2(\partial_\mu f)(\partial^\mu \sigma)\psi &= -2\frac{e}{\hbar^2 c} A_\mu (\hat{p}^\mu \sigma)\psi f = \frac{2e}{\hbar^2 c} \mathbf{A} \cdot (\hat{\mathbf{p}}\sigma)\psi f = -\frac{2e}{\hbar^2 c} \mathbf{A} \cdot \frac{(\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{M}}\sigma)}{r^2} \psi f = \\ &= -\frac{2e}{\hbar c} \mu_N g_N \frac{(\mathbf{I} \times \mathbf{r}) \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{s})}{r^5} \psi f\sigma = 2\frac{\mu_N g_N e}{\hbar c} \frac{(\mathbf{I} \cdot \mathbf{s})}{r^3} \psi f\sigma. \end{aligned}$$

Вид остальных членов в (31) был найден в предыдущих разделах. Подставим все в уравнение, сократим на  $f\sigma$  и учтем, что  $\mathbf{I} + \mathbf{s} = \mathbf{j}$ , после чего получим

$$\begin{aligned} \partial_\mu \partial^\mu \psi - 2\frac{i\alpha Z}{cr} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \left[ \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} + \frac{|\mathbf{s}|^2 + 2(\mathbf{I} \cdot \mathbf{s}) - \alpha^2 Z^2}{r^2} + \right. \\ \left. + 2\frac{\mu_N g_N e}{\hbar c} \frac{(\mathbf{j} \cdot \mathbf{I})}{r^3} + \frac{\mu_N^2 g_N^2 e^2}{\hbar^2 c^2} \frac{(\mathbf{I} \times \mathbf{r})^2}{r^6} \right] \psi = 0. \end{aligned}$$

Из-за малости  $\mu_N$  последнее слагаемое, содержащее  $\mu_N^2$ , можно отбросить. Представляя  $\psi$  в обычном виде  $\psi = e^{-i\omega t} R(r)Y(\theta, \varphi)$ , после разделения переменных придем к следующему радиальному уравнению:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[ -\kappa^2 + 2\frac{\alpha\omega Z}{cr} - \frac{|\mathbf{l}|^2 + |\mathbf{s}|^2 + 2(\mathbf{I} \cdot \mathbf{s}) - \alpha^2 Z^2}{r^2} - 2\frac{\mu_N g_N e}{\hbar c} \frac{(\mathbf{j} \cdot \mathbf{I})}{r^3} \right] R = 0,$$

где

$$\kappa^2 = \frac{\bar{m}^2 c^2}{\hbar^2} - \frac{\omega^2}{c^2}.$$

Учтем, что  $|\mathbf{l}|^2 + |\mathbf{s}|^2 + 2(\mathbf{I} \cdot \mathbf{s}) = |\mathbf{l} + \mathbf{s}|^2 = |\mathbf{j}|^2$ , после чего получим

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[ -\kappa^2 + 2\frac{\alpha\omega Z}{cr} - \frac{|\mathbf{j}|^2 - \alpha^2 Z^2}{r^2} - 2\frac{\mu_N g_N e}{\hbar c} \frac{(\mathbf{j} \cdot \mathbf{I})}{r^3} \right] R = 0.$$

Легко видеть, что оно очень похоже на уравнение (19), приводящее к формуле тонкой структуры (20), только добавлено одно слагаемое, содержащее  $(\mathbf{j} \cdot \mathbf{I})$  и описывающее взаимодействие полного момента электрона со спином ядра. Из-за малости ядерного магнетона  $\mu_N$  это слагаемое малое, и его влияние можно рассматривать как малое возмущение состояния, описываемого невозмущенной волновой функцией тонкой структуры, которую здесь мы обозначим  $\psi_0$ . В таком случае, согласно теории возмущений, мы можем усреднить это слагаемое по состоянию  $\psi_0$ :

$$2 \frac{\mu_N g_N e}{\hbar c} \frac{(\mathbf{j} \cdot \mathbf{I})}{r^3} \longrightarrow \left\langle 2 \frac{\mu_N g_N e}{\hbar c} \frac{(\mathbf{j} \cdot \mathbf{I})}{r^3} \right\rangle_{\psi_0} = 2 \frac{\mu_N g_N e}{\hbar c} (\mathbf{j} \cdot \mathbf{I}) \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{\psi_0}.$$

Из [7] и [8] находим усредненную по состоянию  $\psi_0$  (квантовые числа  $n, l, j$ ) величину

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{\psi_0} = \frac{1}{\lambda_C^3} \frac{\alpha^3 Z^3}{n^3 j(j+1)(l+1/2)},$$

где  $\lambda_C = \hbar/m_e c = \lambda_C/2\pi$  есть комптоновская длина волны электрона, деленная на  $2\pi$ . После этого производим замену

$$2 \frac{\mu_N g_N e}{\hbar c} \frac{(\mathbf{j} \cdot \mathbf{I})}{r^3} \longrightarrow \Omega = 2 \frac{\mu_N g_N e}{\hbar c} \frac{(\mathbf{j} \cdot \mathbf{I})}{\lambda_C^3} \frac{\alpha^3 Z^3}{n^3 j(j+1)(l+1/2)}.$$

Величина  $\Omega$  постоянная, и мы группируем ее с  $\kappa^2$ , вводя новое обозначение

$$\kappa'^2 = \kappa^2 + \Omega.$$

В результате получаем привычное уравнение

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[ -\kappa'^2 + 2 \frac{\alpha \omega Z}{cr} - \frac{|\mathbf{j}|^2 - \alpha^2 Z^2}{r^2} \right] R = 0,$$

решая которое, приходим к соотношению

$$E = \hbar \omega \approx \bar{m} c^2 - \frac{\bar{m} c^2}{2} \left[ \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} + \frac{\alpha^4 Z^4}{n^3} \left( \frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right] + \frac{\hbar^2}{2\bar{m}} \Omega. \quad (33)$$

Последнее слагаемое в этой формуле и есть энергия взаимодействия электрона и ядра через магнитное поле. Обозначим ее через  $E_{jI}$ , получим

$$E_{jI} = \frac{\mu_N g_N e \hbar}{\bar{m} c} \frac{(\mathbf{j} \cdot \mathbf{I})}{\lambda_C^3} \frac{\alpha^3 Z^3}{n^3 j(j+1)(l+1/2)}.$$

Из векторного тождества  $|\mathbf{F}|^2 = (\mathbf{j} + \mathbf{I})^2 = |\mathbf{j}|^2 + |\mathbf{I}|^2 + 2(\mathbf{j} \cdot \mathbf{I})$  находим

$$(\mathbf{j} \cdot \mathbf{I}) = \frac{1}{2} (|\mathbf{F}|^2 - |\mathbf{j}|^2 - |\mathbf{I}|^2) = \frac{1}{2} [F(F+1) - j(j+1) - I(I+1)].$$

Введем «приведенный» магнетон Бора  $\bar{\mu}_B = e\hbar/2\bar{m}c$ , после чего получим формулу для энергии сверхтонкого расщепления

$$E_{jI} = \frac{2\bar{\mu}_B \mu_N g_N}{\lambda_C^3} \frac{\alpha^3 Z^3}{n^3 j(j+1)(l+1/2)} [F(F+1) - j(j+1) - I(I+1)].$$

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как видно из рассмотренных примеров, формализм однокомпонентных волновых функций приводит к верным решениям, из чего следует единственно приемлемый вывод о его правильности. Вместе с тем, область его применимости выходит далеко за рамки квантовомеханических задач. Поэтому, возможно, стоит обратить внимание на теорию [1], частью которой он является?

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Гламазда Д. В.* Аналитическая квантовая теория. <http://quantt.ru>
2. *Шпольский Э. В.* Атомная физика. Т. I. М.: Наука, 1984.
3. *Шпольский Э. В.* Атомная физика. Т. II. М.: Наука, 1984.
4. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. М.: Наука, 1989.
5. *Левич В. Г., Вдовин Ю. А., Мямлин В. А.* Курс теоретической физики. Т. 3. М.: Наука, 1971.
6. *Фриш С. Э.* Оптические спектры атомов. М.; Л.: Гос. изд-во физ.-мат. лит., 1963.
7. *Кузьмичев В. Е.* Законы и формулы физики: Справ. Киев: Наук. думка, 1989.
8. *Ленг К.* Астрофизические формулы. Т. 1. М.: Мир, 1978.
9. Физическая энциклопедия. Т. 4 / Под ред. А. М. Прохорова. М.: Большая Российская энцикл., 1994.
10. *Парселл Э.* Берклевский курс физики. Т. II. Электричество и магнетизм. М.: Наука, 1983.

Получено 27 сентября 2008 г.