УДК 539.184 : 546.11

ОДНОФОТОННЫЙ ПЕРЕХОД С МЕТАСТАБИЛЬНОГО УРОВНЯ АТОМА ВОДОРОДА С УЧЕТОМ СПИНОВЫХ СОСТОЯНИЙ

В. Ч. Жуковский, М. М. Колесникова, А. А. Соколов и *И. Херрманн*

Определяется вероятность спонтанного перехода с метастабильного уровня $2s_{1/2}$ атома водорода с учетом спиновых состояний. При этом исправляется формула Брейта и Теллера, описывающая аналогичный процесс. В заключение вычисляется вероятность вынужденного перехода с этого же уровня.

Основные уравнения

Как известно, дипольные переходы $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ в атоме водорода запрещены, и поэтому уровень $2s_{1/2}$ называется метастабильным. Найдем, в каком мультипольном приближении становится возможным данный переход.

В s-состоянии $\left(l=0,\ j=\frac{1}{2}\right)$ для атома водорода мы можем написать два решения:

а) спин направлен по оси z

$$\psi_{n,\, m_j=\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} G_n \\ 0 \\ i\,\frac{z}{r}\,F_n \\ i\,\frac{x+iy}{r}\,F_n \end{pmatrix}; \tag{1}$$

б) спин направлен против оси z

$$\psi_{n,\, m_j=-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} 0 \\ -G_n \\ -i\,\frac{x-iy}{r}\,F_n \\ i\,\frac{z}{r}\,F_n \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Здесь $n=1, 2, 3\ldots$ — главное квантовое число, G_n и F_n — радиальные составляющие волновых функций, e — заряд, m_0 — масса электрона, а величина $r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ является радиус-вектором.

В случае $n=1$ (наинизшее состояние $1s_{1/2}$) для энергии E_1 и для радиальных функций соответственно находим

$$E_1 = m_0c^2\cos\eta \approx m_0c^2\left(1-\frac{1}{2}\,\alpha_1^2\right), \tag{3}$$

$$\left.\begin{aligned} G_1 &= D_1 r^{\gamma} e^{-k_0 r \sin\eta} \approx \frac{2}{a^{3/2-1/2\alpha_1^2}}\, r^{-\frac{\alpha_1^2}{2}} e^{-\frac{r}{a}}, \\ F_1 &= D_1 \operatorname{tg}\frac{\eta}{2}\, r^{\gamma} e^{-k_0 r \sin\eta} \approx \frac{2}{a^{3/2-1/2\alpha_1^2}}\, \frac{\alpha_1}{2}\, r^{-\frac{\alpha_1^2}{2}} e^{-\frac{r}{a}}, \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

где

$$\alpha_1 = \frac{Ze^2}{c\hbar} = Z\alpha, \quad \eta = \arcsin \alpha_1 \approx \alpha_1 \left(1 + \frac{1}{6}\alpha_1^2\right),$$

$$\gamma = -2 \sin^2\frac{\eta}{2} \approx -\frac{\alpha_1^2}{2}, \quad k_0 = \frac{m_0 c}{\hbar}, \quad a = \frac{1}{k_0 \alpha_1},$$

а нормировочный коэффициент

$$D_1 = \frac{(2k_0 \sin\eta)^{\cos\eta + \frac{1}{2}} \cos\frac{\eta}{2}}{(\Gamma(1 + 2\cos\eta))^{1/2}} \approx \frac{2}{a^{3/2 - \frac{1}{2}\alpha_1^2}}.$$

Последние приближенные значения написаны с точностью до величины порядка α_1^2.

В случае $n = 2$ (метастабильное состояние $2s_{1/2}$) мы имеем

$$E_2 = m_0 c^2 \cos\frac{\eta}{2} \approx m_0 c^2 \left(1 - \frac{1}{8}\alpha_1^2\right),$$

$$G_2 = D_2 r^{\gamma} e^{-k_0 r \sin\frac{\eta}{2}} (1 + g_1 r) \approx \frac{2}{\sqrt{2}\, a^{3/2 - 1/2\alpha_1^2}}\, r^{-\frac{\alpha_1^2}{2}} \times$$

$$\times e^{-\frac{r}{2a}\left(1 + \frac{1}{8}\alpha_1^2\right)} \left(1 - \frac{r}{2a}\left(1 + \frac{1}{2}\alpha_1^2\right)\right), \tag{5}$$

$$F_2 = D_2 \operatorname{tg}\frac{\eta}{2}\, r^{\gamma} e^{-k_0 r \sin\frac{\eta}{2}} (1 + f_1 r) \approx \frac{\frac{\alpha_1}{2}}{\sqrt{2}\, a^{3/2 - 1/2\alpha_1^2}}\, r^{-\frac{\alpha_1^2}{2}} \times$$

$$\times e^{-\frac{r}{2a}\left(1 + \frac{1}{8}\alpha_1^2\right)} \left[1 - \frac{r}{4a}\left(1 + \frac{7}{16}\alpha_1^2\right)\right],$$

где

$$f_1 = \frac{k_0 \operatorname{tg}\frac{\eta}{4}}{1 - 2\cos\frac{\eta}{2}} \approx -\frac{1}{4a}\left(1 + \frac{7}{16}\alpha_1^2\right), \quad g_1 = k_0 \frac{\operatorname{tg}\frac{\eta}{2}}{1 - 2\cos\frac{\eta}{2}} \approx -\frac{1}{2a}\left(1 + \frac{1}{2}\alpha_1^2\right),$$

а постоянная D_2 в общем случае определяется из условия нормировки

$$D_2 = \frac{\left(2k_0 \sin\frac{\eta}{2}\right)^{\cos\eta + \frac{1}{2}}}{(\Gamma(1 + 2\cos\eta))^{1/2}} \sqrt{\cos\frac{\eta}{4} \cos\frac{\eta}{2} \cos\frac{3\eta}{4}} \approx \frac{1}{\sqrt{2}\, a^{3/2 - 1/2\alpha_1^2}}. \tag{6}$$

Спонтанные переходы

Вероятность перехода $2s_{1/2} \to 1s_{1/2}$ вычисляется по формуле

$$w = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \int \frac{d^3\varkappa}{\varkappa}\, \delta(\varkappa - \varkappa_{21})\, \Phi, \tag{7}$$

где

$$\varkappa_{21} = \frac{E_2 - E_1}{c\hbar} \approx \frac{3}{8}\,\frac{\alpha_1}{a}, \tag{8}$$

а величина

$$\Phi = (\bar{\boldsymbol{\alpha}}^{+}\bar{\boldsymbol{\alpha}}) - (\bar{\boldsymbol{\alpha}}^{+}\boldsymbol{\varkappa}^{0})\,(\bar{\boldsymbol{\alpha}}\boldsymbol{\varkappa}^{0}) \tag{9}$$

выражается через матричный элемент

$$\bar{\boldsymbol{\alpha}} = \int \psi_2^{+}\boldsymbol{\alpha}\psi_1 e^{-i\boldsymbol{\varkappa}\boldsymbol{r}} d^3x \tag{10}$$

матрицы скорости Дирака $\boldsymbol{\alpha}$.

Подставляя решения (1) — (5) в матричный элемент (10), мы найдем для величины Φ следующие значения в случае перехода без переворота ($\Phi^{\uparrow\uparrow}$) и с переворотом ($\Phi^{\uparrow\downarrow}$) спина:

$$\Phi^{\uparrow\uparrow} = \sin^2\vartheta\,\frac{1}{2}\,\Phi^0, \quad \Phi^{\uparrow\downarrow} = (1 + \cos^2\vartheta)\,\frac{1}{2}\,\Phi^0, \tag{11}$$

где

$$\Phi^0 = \frac{\alpha_1^2}{a^{6-2\alpha_1^2}} \left| \int\limits_0^\infty dr\, r^{2-\alpha_1^2} e^{-\frac{3}{2}\frac{r}{a}\left(1+\frac{\alpha_1^2}{24}\right)} \times \right.$$

$$\left. \times \left[1 - \frac{3}{8}\,\frac{r}{a}\left(1 + \frac{23}{48}\,\alpha_1^2\right)\right] J(\varkappa r) \right|^2, \tag{12}$$

$$J(\varkappa r) = \int\limits_0^\pi d\theta \sin\theta \cos\theta e^{-i\varkappa r\cos\theta}, \tag{13}$$

а ϑ и θ являются углами, которые образуют волновой вектор фотона $\boldsymbol{\varkappa}$ соответственно с осью z (первоначальным направлением спина) и с радиус-вектором $\boldsymbol{r}$. Учитывая разложение экспоненты по парциальным волнам (разложение по орбитальному квантовому числу l)

$$e^{-i\varkappa r\cos\theta} = \sqrt{\frac{\pi}{2\varkappa r}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\,(-i)^l J_{l+1/2}(\varkappa r)\, P_l(\cos\theta), \tag{14}$$

легко убедиться, что в интеграле $J(\varkappa r)$ дает отличный от нуля вклад только член с $l = 1$

$$J(\varkappa r) = -i\sqrt{\frac{2\pi}{\varkappa r}}\, J_{3/2}(\varkappa r) = 2i\left(\frac{\cos\varkappa r}{\varkappa r} - \frac{\sin\varkappa r}{\varkappa^2 r^2}\right) \approx$$

$$\approx -\frac{2i}{3}\,\varkappa r\left(1 - \frac{1}{10}\,\varkappa^2 r^2\right). \tag{15}$$

Этот член соответствует магнитному дипольному излучению $\left(\Delta j = 0 \text{ при } j = \frac{1}{2}\right)$ с учетом релятивистских членов, пропорциональных α_1^2.

Благодаря наличию в (7) δ-функции будем иметь

$$\varkappa = \varkappa_{21} \approx \frac{3}{8}\,\frac{\alpha_1}{a}. \tag{16}$$

Вычисляя интеграл (12), имеем

$$\Phi^0 = \frac{\alpha_1^8}{3^6}. \tag{17}$$

Отсюда с помощью (7) находим вероятность перехода $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ как без переворота, так и с переворотом спина

$$w_1^{\uparrow\uparrow} = \frac{z^{10}\alpha^{11}}{2^4 3^5} \frac{m_0 c^2}{\hbar} \int_0^\pi \sin^3 \vartheta d\vartheta = \frac{z^{10}\alpha^{11}}{2^2 3^6} \frac{m_0 c^2}{\hbar}, \tag{18}$$

$$w_1^{\uparrow\downarrow} = \frac{z^{10}\alpha^{11}}{2^4 3^5} \frac{m_0 c^2}{\hbar} \int_0^\pi \sin \vartheta (1 + \cos^2 \vartheta) d\vartheta = 2w_1^{\uparrow\uparrow}. \tag{19}$$

Для суммарной же вероятности перехода имеем

$$w_1 = w_1^{\uparrow\uparrow} + w_1^{\uparrow\downarrow} = \frac{z^{10}\alpha^{11}}{2^2 3^5} \frac{m_0 c^2}{\hbar}. \tag{20}$$

Таким образом, однофотонный переход $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$, который для электрического дипольного излучения является строго запрещенным, оказывается возможным за счет релятивистских членов магнитного дипольного излучения.[1]

Брейт и Теллер [1] получили для однофотонного перехода $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ формулу, отличающуюся от (20) численным коэффициентом

$$w_1' = \frac{Z^{10}\alpha^{11}}{2^4 3^3} \frac{m_0 c^2}{\hbar}. \tag{20a}$$

Результат (20а) может быть получен, если в скобках равенства (15) отбросить член $\frac{1}{10}\varkappa^2 r^2$, т. е. положить $J(\varkappa r) = -\frac{2}{3} i\varkappa r$. Однако при вычислении матричного элемента основной член, стоящий в скобках и равный единице, дает отличное от нуля значение лишь при учете в волновой функции релятивистских поправок, пропорциональных α_1^2 (приближение Брейта—Теллера), в то время как для второго члена $\frac{1}{10}\varkappa^2 r^2$, имеющего порядок α_1^2 и отброшенного в работе [1], мы можем ограничиться нерелятивистским приближением. Поскольку оба члена в конечном счете дают результаты одного и того же порядка, необходимо учитывать их оба.

Если учесть лэмбовский сдвиг уровней в атоме водорода, то становится возможным еще спонтанный переход $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$, вероятность которого

$$w_{\text{лэмб}} = 0.83\alpha^{14} \frac{m_0 c^2}{\hbar} \tag{21}$$

будет примерно в 3000 раз меньше вероятности перехода $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$. Поэтому, несмотря на наличие разрешенного перехода $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ со сравнительно большой вероятностью [2]

$$w_{2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}} = w_0 = \left(\frac{2}{3}\right)^8 Z^4 \alpha^5 \frac{m_0 c^2}{\hbar}, \tag{22}$$

спонтанный переход $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ будет менее вероятен, чем рассматриваемый нами.

С уровня $2s_{1/2}$ на уровень $1s_{1/2}$ возможен еще двухфотонный переход, вероятность которого была найдена в работах [1, 3]

$$w_2 = 0.2 \left(\frac{2}{3}\right)^8 Z^6 \alpha^8 \frac{m_0 c^2}{2\pi\hbar}. \tag{23}$$

---

[1] Учет взаимодействия с аномальным магнитным моментом вносит небольшую поправку в вероятность перехода, а именно, она становится равной $w_{\text{аном.}} = w_1 \times \times \left(1 - \frac{\alpha}{2\pi}\right)$.

Сопоставляя формулу (20) с (23) мы видим, что отношение вероятности однофотонного перехода $2s_{1/2} \to 1s_{1/2}$ к соответствующему двухфотонному равно

$$\frac{w_1}{w_2} \approx 0.8 Z^4 \alpha^3.$$

Отсюда следует, что для атома водорода примерно на 10^6 двухфотонных переходов $2s_{1/2} \to 1s_{1/2}$ будет приходиться один однофотонный переход. Для более тяжелых водородоподобных атомов это отношение должно увеличиваться пропорционально Z^4.

Вынужденные переходы

Однофотонный переход $2s_{1/2} \to 1s_{1/2}$ может стать особенно заметным при вынужденных (индуцированных) переходах.

Вероятность вынужденного перехода равна [4]

$$w_{\text{инд.}} = \frac{2\pi e^2 c N(\varkappa)}{\hbar \varkappa L^3} \Phi \frac{4\tau}{1 + 4\tau^2 c^2 (\varkappa - |\varkappa_{nn'}|)^2}, \tag{24}$$

где среднее время жизни τ для метастабильного состояния вводится в результате размазывания δ-функции

$$\frac{\partial}{\partial t} \left| \int_0^t e^{-ict(\varkappa_{nn'} \pm \varkappa)} dt \right|^2 \to \frac{\left| \int_0^t e^{-ict(\varkappa_{nn'} \pm \varkappa) - \frac{t}{2\tau}} dt \right|^2}{\tau} =$$

$$= \frac{4\tau}{1 + 4\tau^2 c^2 (\varkappa - |\varkappa_{nn'}|)^2}. \tag{25}$$

Связывая далее число фотонов $N(\varkappa)$ с напряженностью внешнего электрического поля $\mathcal{E}$, обладающего частотой $\omega = c\varkappa$, при помощи соотношения

$$\frac{\hbar\omega N(\varkappa)}{L^3} = \frac{\mathcal{E}^2}{4\pi} \tag{26}$$

мы найдем вероятность вынужденного перехода в случае резонанса $\varkappa = \varkappa_{nn'} = \varkappa_{21}$

$$w_{\text{инд.}} = \frac{2e^2 \mathcal{E}^2 \tau}{\hbar^2 \varkappa_{21}^2} \Phi^0. \tag{27}$$

Подставляя сюда вместо частоты излучения $\varkappa_{21}$ значение (8), а вместо Φ^0 выражение (17), найдем

$$\frac{w_{\text{инд.}}}{w_2} \approx 15.7 \left(\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_{\text{ат.}}}\right)^2 \alpha^2 \frac{m_0 c^2}{\hbar} \tau, \tag{28}$$

где

$$\mathcal{E}_{\text{ат.}} = -\frac{e}{a^2} = 5.13 \cdot 10^9 \text{ в/см},$$

а w_2 — вероятность двухфотонного перехода (22). Формула (28) пригодна для не слишком больших $\mathcal{E}$, когда эффектом Штарка можно пренебречь.

Литература

[1] G. Breit, E. Teller. Astrophys. J., *91*, 215, 1940.
[2] Г. Бете. Квантовая механика простейших систем, 231. ОНТИ, Л.—М., 1935.
[3] Б. А. Зон, Л. П. Рапопорт. ЖЭТФ, Письма в Редакцию, *7*, 70, 1968.
[4] Сб. «Синхротронное излучение». Под ред. А. А. Соколова и И. М. Тернова, 140. Изд. «Наука», М., 1968.

Поступило в Редакцию 12 мая 1969 г.