

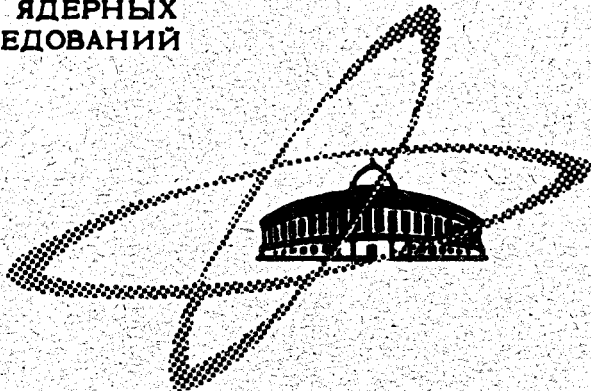
И-20

7/IV-69

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна.

P4 - 4328



А.С.Иванов

ЛАБОРАТОРИЯ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

СМЕШИВАНИЕ УРОВНЕЙ АТОМА ВОДОРОДА
ЗА СЧЕТ СВЕРХТОНКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

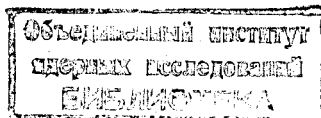
1969

P4 - 4328

А.С.Иванов

СМЕШИВАНИЕ УРОВНЕЙ АТОМА ВОДОРОДА
ЗА СЧЕТ СВЕРХТОНКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Направлено в ЖЭТФ



Если поместить атом во внешнее магнитное поле H , то те его состояния, которые обладают одинаковыми четностями P и одинаковыми проекциями полного момента M_F , перестают быть стационарными и смешиваются друг с другом. Известно, что указанное смешивание изменяет магнитные моменты атомов и влияет на правила отбора для оптических переходов (см., например, /1/).

Если ядро атома обладает магнитным моментом, то можно считать, что атом находится в магнитном поле, и следует ожидать появления аналогичных эффектов. Так как в данном случае полный момент F системы сохраняется, то для смешивания необходимо совпадение не только P и M_F , но также и F . Поскольку величина смешивания обратно пропорциональна расстоянию между смешивающимися уровнями, целесообразно рассматривать энергетически близкие состояния, обладающие одинаковыми значениями квантового числа n .

Смешиваться могут состояния как с одинаковыми, так и с различными значениями орбитального момента l . Ситуация, в которой смешиваются уровни, имеющие одинаковые значения орбитального момента, была рассмотрена в ряде работ (см., например, /2,3,4,5/). В работах /2,3/ получены поправки к магнитному моменту системы, которые оказались линейными по смешиванию; их величина на два порядка меньше магнитного момента ядра. Там же доказано, что при помещении атома во внешнее магнитное поле, разрывающее сверхтонкую связь, добавки к магнитному моменту системы не изменяются.

Автором [4,5] показано, что рассматриваемое смешивание приводит к снятию запретов для некоторых оптических переходов.

В настоящей работе изучаются состояния с различающимися значениями орбитального момента. Конкретно речь идет об атоме водорода, так как только в этом случае состояния с различными l могут быть достаточно близкими. Уровни со значениями орбитального момента, отличающимися на единицу, не будут смешиваться магнитным полем ядра, так как они обладают разной четностью. Поскольку спин протона I и спин электрона s равны $\frac{1}{2}$, смешиваться могут уровни с $\Delta l = 0, 2$, четность которых одинакова. Поэтому интересующие нас эффекты могут иметь место только при $n \geq 3$.

Сравним расстояния между смешивающимися уровнями в случаях $\Delta l = 0$ и $\Delta l = 2$. Пользуясь формулой (1) ^{x)}, получаем в первом случае

$$\delta_{l=l'} = \frac{a^2}{l(l+1)n^3} Ry$$

и во втором случае

$$\delta_{l=l'+2} = \frac{a^2}{(l'+1)(l'+2)n^3} Ry \quad \text{xx)}$$

где a - постоянная тонкой структуры, $Ry = \frac{1}{2} \frac{m e^4}{\hbar^2}$, m - масса электрона, e - его заряд. Величины $\delta_{l=l'}$ и $\delta_{l=l'+2}$ близки друг к другу, поэтому и смешивание в обоих случаях будет по порядку величины одинаковым.

Так как расстояния между смешивающимися уровнями много больше расстояний между компонентами сверхтонкого расщепления, то для отыскания новых стационарных состояний можно воспользоваться теорией возмущений, принимая за малое возмущение взаимодействие магнитного момента ядра с моментом оболочки.

x) Формулы, обозначенные римскими цифрами, взяты из приложения.

xx) Лэмбовский сдвиг уровня с $l'=0$ уменьшает величину $\delta_{l=l'+2}$ приблизительно на 10 %.

Выражение для энергии взаимодействия имеет вид:

$$W = a_l \vec{l} \vec{I} - a_0 \{ \vec{s} - 3(\vec{s} \vec{n}) \vec{n} \} \vec{I},$$

где \vec{n} - единичный вектор, направленный по радиусу-вектору электрона \vec{r} ,

$$a_l = g_l a^2 a_0^3 \left(\frac{m}{m_p} \right) \frac{1}{r^3} Ry,$$

$a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2}$ - боровский радиус, m_p - масса протона, g_l - гироманнитное отношение ядра. Запишем выражение для волновой функции системы в состоянии с орбитальным моментом l :

$$\phi_1 = \psi_1 + \beta \psi_2 - \frac{1}{2} \beta^2 \psi_1, \quad (1)$$

где

$$\psi_1 = |s l Y I F M\rangle, \quad \psi_2 = |s l' Y' I' F M\rangle,$$

$$\beta = \frac{\langle s l Y I F M | W | s l' Y' I' F M \rangle}{E_{l_y} - E_{l'_y}}$$

Y - полный момент оболочки. Член второго порядка в формуле (1) учтен по соображениям, которые будут ясны ниже. Волновая функция состояния с орбитальным моментом l' запишется следующим образом:

$$\phi_2 = \psi_2 - \beta \psi_1 - \frac{1}{2} \beta^2 \psi_2. \quad (1')$$

Определение коэффициента смешивания β связано с вычислением матричных элементов оператора возмущения. Применяя формулы (II, III, IV, V, VI), нетрудно получить:

$$\langle s \ell Y I F M | W | s \ell' Y' I' F M \rangle =$$

$$= -\langle a_{\ell} \rangle (-1)^{I+Y'+2+F} \begin{Bmatrix} Y & I & F \\ I & Y' & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} s & \ell & Y \\ s & \ell' & Y' \\ 1 & 2 & 1 \end{Bmatrix} \times \quad (2)$$

$$\times [30(2Y+1)(2Y'+1)s(s+1)(2s+1)I(I+1)(2I+1)]^{1/2} \times (\ell \| c^2 \| \ell') ,$$

где

$$\langle a_{\ell} \rangle = g_I a^2 \left(\frac{m}{m_p} \right) \int_0^{\infty} R_{n\ell} \frac{1}{r} R_{n\ell-2} dr,$$

$R_{n\ell}$ - радиальная часть волновой функции. Значения g_I и g_s - символов, входящих в выражение (2), а также матричных элементов $(\ell \| c^2 \| \ell')$ затабулированы.

Вычислим теперь проекцию магнитного момента атома в состояниях ϕ_1 и ϕ_2 на ось z . Оператор

$$\hat{\mu}_z = -\mu_N g_I \hat{I}_z - \mu_0 (g_{\ell} \hat{\ell}_z + g_s \hat{s}_z),$$

где g_s , g_{ℓ} - гиромангнитные факторы, связанные с электроном, μ_0 - магнетон Бора, μ_N - ядерный магнетон. Нам нужно усреднить $\hat{\mu}_z$ по состоянию ϕ . Дополнительный магнитный момент, возникающий при смешивании уровней с одинаковыми ℓ , пропорционален первой степени β . В случае же смешивания уровней, обладающих разными орбитальными моментами, дополнительный магнитный момент оказывается квадратичным по β . Пренебрегая членами порядка β^3 , имеем:

$$\mu_z = \langle \psi_1 + \beta \psi_2 | -\frac{1}{2} \beta^2 \hat{\mu}_z | \psi_1 + \beta \psi_2 - \frac{1}{2} \beta^2 \psi_1 \rangle = \quad (3)$$

$$= \langle \psi_1 | \hat{\mu}_z | \psi_1 \rangle + \beta^2 \langle \psi_2 | \hat{\mu}_z | \psi_2 \rangle - \langle \psi_1 | \hat{\mu}_z | \psi_1 \rangle =$$

Первый член правой части формулы (3) представляет собой магнитный момент системы без учета смешивания, второй - дополнительный магнитный момент, обязанный своим появлением взаимодействию магнитного поля спина протона с моментом электрона:

$$\mu_{\text{доп}} = \beta^2 \langle \psi_2 | \hat{\mu}_z | \psi_2 \rangle - \langle \psi_1 | \hat{\mu}_z | \psi_1 \rangle = \quad (4)$$

Для второго состояния получим:

$$\mu_{\text{доп}} = -\beta^2 \langle \hat{\psi}_2 | \hat{\mu}_z | \psi_2 \rangle - \langle \psi_1 | \hat{\mu}_z | \psi_1 \rangle = \quad (5)$$

Используя известные формулы (II, III, IV, V), легко подсчитать значения матричных элементов, входящих в выражения (4) и (5):

$$\langle s \ell Y I F M | \hat{\mu}_z | s \ell Y I F M \rangle =$$

$$= -\mu_0 M \frac{[3Y(Y+1) + \ell(\ell+1) - s(s+1)][F(F+1) + Y(Y+1) - I(I+1)]}{4F(F+1)Y(Y+1)} \quad (6)$$

В случае смешивания уровней $3d_{3/2}$ с полным моментом $F=1$ и $3s_{1/2}$ с $F=1$ дополнительный магнитный момент имеет следующую величину:

$$\mu_{\text{доп}}^d = 1,15 \mu_0 \beta^2 = 6,44 \mu_0 g_I \left(\frac{m}{m_p} \right)^2, \quad (7)$$

$$\mu_{\text{доп}}^s = -1,15 \mu_0 \beta^2 = -6,44 \mu_0 g_I \left(\frac{m}{m_p} \right)^2,$$

где $\mu_{\text{доп}}^d$ - дополнительный магнитный момент в d -состоянии, $\mu_{\text{доп}}^s$ - дополнительный магнитный момент в s -состоянии.

Сдвиг уровней за счет смешивания также определяется поправкой второго порядка и в случае смешивания уровней $3d_{3/2}$ и $3s_{1/2}$ равен

$$\Delta E = 0,1 g_I^2 \left(\frac{m}{m_p} \right)^2 a^2 R_y. \quad (8)$$

Его величина не выходит за пределы естественной ширины уровня.

Выясним теперь влияние смешивания уровней с различными значениями орбитального момента на правила отбора для электрических дипольных переходов.

Рассмотрим три уровня: А, В и С. Пусть уровень А — характеризуется квантовыми числами $(n=n'; l=l'+1; Y=l'+\frac{1}{2})$, В — $(n=n''; l=l''; Y=l''-\frac{1}{2})$, С — $(n=n''; l=l''-2; Y=l''-\frac{3}{2})$, причем $n' \neq n''$ и $l' \geq 2$. Переход А → В разрешен, поскольку $\Delta l = 1$, $\Delta Y = 1$. Рассмотрим переход А → С. Для него $\Delta l = 3$ и $\Delta Y = 2$, т.е. имеется запрет как по l так и по Y . Однако фактически переход будет иметь место ввиду того, что уровни В и С смешаны полем ядра. Обозначим интенсивность перехода А → С через I_{AC} . Тогда легко видеть, что

$$I_{AC} = \beta^3 \frac{\omega_{AC}}{\omega_{AB}} I_{AB}, \quad (9)$$

где $\omega_{ik} = \frac{E_i - E_k}{h}$, β — вычисленный выше коэффициент смешивания уровней В и С, а I_{AB} — интенсивность перехода А → В.

Выше было рассмотрено появление дополнительных магнитных моментов за счет смешивания.

В заключение заметим, что если учесть смешивание, то оказывается, что атом водорода в состоянии с $l = 0$ обладает также отличным от нуля квадрупольным электрическим моментом. Из того, что оператор квадрупольного момента не диагонален по квантовому числу l , можно заключить, что квадрупольный момент является величиной первого порядка по смешиванию.

Автор искренне и глубоко благодарен профессору М.И. Подгорецкому за предоставление темы, внимание к работе и большую помощь. Автор благодарит В.Г. Барышевского за многочисленные полезные советы и обсуждения.

Приложение

Энергия тонкого расщепления определяется из формулы

$$\Delta E_{n l j} = a^2 \left\{ \frac{3}{4n} - \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right\} \frac{1}{n^3} R_y. \quad (I)$$

Матричные элементы произведения операторов U^{k_1} и V^{k_2} , из которых U действует на функции, связанные с моментом j_1 , а V — с j_2 , равны

$$(\gamma j_1 j_2 : j \| [U^{k_1} \times V^{k_2}]^k \| \gamma' j_1' j_2' : j') = \sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)(2k+1)} \times$$

$$\times \sum_{\gamma''} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ j_1' & j_2' & j' \\ k_1 & k_2 & k \end{Bmatrix} (\gamma j_1 \| U^{k_1} \| \gamma'' j_1') (\gamma'' j_2 \| V^{k_2} \| \gamma' j_2'); \quad (II)$$

$$(\gamma j_1 j_2 : j m \| (U^k V^k) \| \gamma' j_1' j_2' : j m) = \delta_{j_1 j_1'} \delta_{j_2 j_2'} \delta_{m m'} \times$$

$$\times \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ j_2' & j_1' & k \end{Bmatrix} (-1)^{j_2+j_1'+2k+j} \times$$

$$\times \sum_{\gamma''} (\gamma j_1 \| U^k \| \gamma'' j_1') (\gamma'' j_2 \| V^k \| \gamma' j_2'); \quad (III)$$

$$(\gamma j_1 j_2 : j \| U^k \| \gamma' j_1' j_2' : j') = \delta_{j_1 j_1'} \delta_{j_2 j_2'} \sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)} \times$$

$$\times \begin{Bmatrix} j_2 & j_1 & j \\ k & j_1' & j_1' \end{Bmatrix} (\gamma j_1 \| U^k \| \gamma' j_1'). \quad (IV)$$

Матричные элементы оператора момента

$$(I \| I \| I) = \sqrt{I(I+1)(2I+1)} \delta_{II'} \quad (V)$$

Оператор взаимодействия магнитного момента ядра с моментом электрона может быть представлен следующим образом:

$$\begin{aligned} W &= a_{\ell} \vec{\ell} \vec{I} - a_{\ell} \{ \vec{s} - 3(\vec{s} \vec{n}) \vec{n} \} \vec{I} = \\ &= a_{\ell} \vec{\ell} \vec{I} - a_{\ell} \sqrt{10} \chi [c^2 \times s^1] I^1. \end{aligned} \quad (VI)$$

Формулы (I) и (VI) взяты из работы /6/. Формулы (II-V) - из работы /7/.

Л и т е р а т у р а

1. В.Л. Любошиц, В.А. Анишук, М.И. Подгорещкий. Ядерная физика, 3, 582 (1966).
2. K.G. Kessler. Phys. Rev., 77, 559 (1950).
3. P. Kusch. Phys. Rev., 78, 615 (1950).
4. R.H. Garstang. J., Opt. Soc. Am., 52, 845 (1962).
5. R.H. Garstang. Astrophis. J., 148, 579 (1967).
6. И.И. Собельман. Введение в теорию атомных спектров. §§13,14,22. М., Физматгиз, 1963.
7. В.В. Балашов. Теоретический ядерный практикум. §2. Изд. Московского университета, 1963.

Рукопись поступила в издательский отдел
19 февраля 1969 года.