

§ 34. Тонкая структура уровней атома водорода

Определим релятивистские поправки к уровням энергии атома водорода — электрона в кулоновом поле неподвижного ядра¹⁾. Скорость электрона в атоме водорода $v/c \sim \alpha \ll 1$. Поэтому искомые поправки можно вычислить путем применения теории возмущений — как среднее по невозмущенному состоянию (т. е. по нерелятивистской волновой функции) от релятивистских членов в приближенном гамилтониане (33,12). Для несколько большей общности положим заряд ядра равным Ze , предполагая при этом, однако, что и $Z\alpha \ll 1$.

Напряженность поля ядра $E = Zer/r^3$, а его потенциал удовлетворяет уравнению $\Delta\Phi = -4\pi Ze\delta(r)$. Подставив это в (33,12) (последние три члена), с учетом отрицательности заряда электрона получим оператор возмущения

$$\hat{V} = -\frac{\hat{p}^4}{8m^3} + \frac{Z\alpha}{2r^3m^2} \hat{1}\hat{s} + \frac{Z\alpha\pi}{2m^2} \delta(r). \quad (34,1)$$

Поскольку согласно нерелятивистскому уравнению Шредингера

$$\hat{p}^2\psi = 2m\left(\epsilon_0 + \frac{Z\alpha}{r}\right)\psi$$

($\epsilon_0 = -mZ^2\alpha^2/2n^2$ — невозмущенный уровень, n — главное квантовое число), среднее значение

$$\overline{\hat{p}^4} = 4m^2 \overline{\left(\epsilon_0 + \frac{Z\alpha}{r}\right)^2}.$$

Эта величина, как и среднее значение второго члена в (34,1), вычисляется с помощью формул (см. III, § 36)

$$\overline{r^{-1}} = \frac{m\alpha Z}{n^2}, \quad \overline{r^{-2}} = \frac{(m\alpha Z)^2}{n^3(l+1/2)}, \quad \overline{r^{-3}} = \frac{(m\alpha Z)^3}{n^3l(l+1/2)(l+1)} \quad (34,2)$$

(последняя относится к $l \neq 0$); собственное значение

$$I_s = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right], & l \neq 0, \\ 0, & l = 0. \end{cases}$$

Наконец, усреднение третьего члена производится с помощью формул

$$\psi(0) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Zam}{n} \right)^{3/2}, & l=0, \\ 0, & l \neq 0. \end{cases} \quad (34,3)$$

¹⁾ Влияние движения ядра на значения этих поправок представляет собой эффект более высокого порядка малости, которым мы здесь не интересуемся.

Результат простого вычисления с использованием написанных формул может быть представлен во всех случаях (при всех j и l) в виде

$$\Delta\varepsilon = -\frac{m(Z\alpha)^4}{2n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (34,4)$$

Формула (34,4) и дает искомую релятивистскую поправку к энергии водородных уровней — энергию тонкой структуры¹⁾. Напомним, что в нерелятивистской теории имеет место как вырождение по направлениям спина, так и кулоново вырождение по l . Тонкая структура (спин-орбитальное взаимодействие) снимает это вырождение, но не полностью, — остаются двукратно взаимно вырожденными уровни с одинаковыми n , j , но разными $l = j \pm 1/2$ (невыврожденными оказываются при этом лишь уровни с наибольшим возможным при заданном n значением $j = j_{\max} = l_{\max} + 1/2 = n - 1/2$). Таким образом, последовательность водородных уровней с учетом тонкой структуры такова:

$$\begin{aligned} & 1s_{1/2}; \\ & \underbrace{2s_{1/2}, 2p_{1/2}}_2, 2p_{3/2}; \\ & \underbrace{3s_{1/2}, 3p_{1/2}}_3, \underbrace{3p_{3/2}, 3d_{3/2}}_3, 3d_{5/2}; \\ & \dots \end{aligned}$$

Уровень с главным квантовым числом n расщепляется на n компонент тонкой структуры.

Напомним, что в нерелятивистской механике «случайное» вырождение уровней энергии в кулоновом поле связано с существованием специфического для этого поля закона сохранения: сохраняется величина \hat{A} , оператор которой

$$\hat{A} = \frac{\mathbf{r}}{r} + \frac{1}{2m\alpha} \{ [\hat{\mathbf{p}}] - [\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{l}}] \}$$

(см. III (36,30)). Со специфическим законом сохранения связано и остающееся в релятивистском случае двукратное вырождение: гамильтониан уравнения Дирака $\hat{H} = \alpha\hat{\mathbf{p}} + \beta m - e^2/r$ коммутативен с оператором

$$\hat{I} = \frac{\mathbf{r}}{r} \Sigma + \frac{l}{m\alpha} \beta (\Sigma\hat{\mathbf{l}} + 1) \gamma^5 (\hat{H} - m\beta)$$

(М. Н. Johnson, В. А. Lippmann, 1950). В нерелятивистском пределе этот оператор $\hat{I} \rightarrow \Sigma\hat{A}$.

¹⁾ Эта формула (как и более точная формула (36,10)) была получена Зоммерфельдом (А. Sommerfeld) из старой теории Бора еще до создания квантовой механики.

Мы увидим в дальнейшем (§ 123), что это оставшееся вырождение снимается так называемыми радиационными поправками (*лэмбовский сдвиг*), не учитываемыми уравнением Дирака одноэлектронной задачи.

Забегаая вперед, укажем уже здесь, что по порядку величины эти поправки $\sim mZ^4\alpha^5 \ln(1/\alpha)$. Поправка же второго порядка по спин-орбитальному взаимодействию была бы $\sim m(Z\alpha)^6$, так что ее отношение к радиационным поправкам $\sim Z^2\alpha/\ln(1/\alpha)$. Для водорода ($Z=1$) это отношение заведомо мало, и потому задача о точном решении уравнения Дирака в этом случае не имеет смысла. Эта задача, однако, может иметь смысл для уровней энергии электрона в поле ядра с большим Z (см. § 36).

§ 35. Движение в центрально-симметричном поле

Рассмотрим движение электрона в центрально-симметричном электрическом поле.

Поскольку при движении в центральном поле сохраняются момент и четность (относительно центра поля, выбранного в качестве начала координат), к угловой зависимости волновых функций такого движения относится все сказанное в § 24 по поводу сферических волн свободных частиц. Меняются лишь радиальные функции. Соответственно этому будем искать волновую функцию стационарных состояний (в стандартном представлении) в виде

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(r) \Omega_{jlm} \\ (-1)^{\frac{l+l-l'}{2}} g(r) \Omega_{j'l'm} \end{pmatrix}, \quad (35,1)$$

где $l = j \pm 1/2$, $l' = 2j - l$, а степень -1 введена для упрощения последующих формул.

Уравнение Дирака в стандартном представлении дает следующую систему уравнений для φ и χ :

$$(\epsilon - m - U)\varphi = \sigma \hat{r} \chi, \quad (\epsilon + m - U)\chi = \sigma \hat{r} \varphi, \quad (35,2)$$

где $U(r) = e\Phi(r)$ — потенциальная энергия электрона в поле. Вычисление результата подстановки сюда выражений (35,1) сводится к вычислению правых сторон этих уравнений.

Выражая шаровой спинор $\Omega_{j'l'm}$ через Ω_{jlm} согласно

$$\Omega_{j'l'm} = i^{l-l'} \left(\sigma \frac{r}{r} \right) \Omega_{jlm}$$

(см. (24,8)), пишем:

$$(\sigma \hat{r}) \chi = -i (\sigma \hat{r}) (\sigma \hat{r}) \frac{g}{r} \Omega_{jlm}.$$