где $\mathbf{d}_s$ — компоненты Фурье дипольного момента, т. е. коэффициенты разложения

$$\mathbf{d}(t) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} \mathbf{d}_s e^{-is\omega t}. \tag{45,10}$$

Квантовая формула (45,8) получается из (45,9) заменой этих компонент Фурье матричными элементами соответствующих переходов. Это правило (выражающее собой *принцип соответствия* Бора) является частным случаем общего соответствия между компонентами Фурье классических величин и квантовыми матричными элементами в квазиклассическом случае (см. III, § 48). Излучение квазиклассично для переходов между состояниями с большими квантовыми числами; при этом частота перехода $\hbar\omega = E_i - E_f$ мала по сравнению с энергиями излучателя E_i и E_f. Это обстоятельство, однако, не привело бы к каким-либо изменениям в виде формулы (45,8), справедливой для любых переходов. Этим объясняется тот (в известном смысле случайный) факт, что принцип соответствия для интенсивности излучения оказывается справедливым не только в квазиклассическом, но и в общем квантовом случае.

§ 46. Электрическое мультипольное излучение

Вместо того чтобы рассматривать излучение фотона в заданном направлении (т. е. с заданным импульсом), рассмотрим теперь излучение фотона с определенными значениями момента j и его проекции m на некоторое избранное направление z. Мы видели в § 6, что такие фотоны могут быть двух типов — электрического и магнитного; начнем с излучения фотонов электрического типа. При этом снова будем считать размеры излучающей системы малыми по сравнению с длиной волны.

Вычисления удобно производить с помощью волновых функций фотона в импульсном представлении, т. е. представив 4-вектор $A^{\mu}(\mathbf{r})$ в виде интеграла Фурье. Тогда матричный элемент

$$V_{fi} = e\int j_{fi}^{\mu}(\mathbf{r})\, A_{\mu}^{*}(\mathbf{r})\, d^3x = e\int d^3x \cdot j_{fi}^{\mu}(\mathbf{r}) \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} A^{*}(\mathbf{k})\, e^{-i\mathbf{kr}} \tag{46,1}$$

(для упрощения записи формул опускаем индексы ωjm у волновых функций фотона).

Для Ej-фотона берем волновую функцию из (7,10), выбрав произвольную постоянную C равной

$$C = -\sqrt{\frac{j+1}{j}}\,.$$

Цель такого выбора состоит в том, чтобы в пространственных компонентах волновой функции (A) сократились члены, содержащие шаровые функции порядка $j-1$ (как это видно из формул (7,16)). Тогда $\mathbf{A}$ будет содержать только шаровые функции порядка $j+1$, в результате чего соответствующий вклад в V_{fi} окажется (как это будет очевидно из дальнейшего вычисления) более высокого порядка малости (по a/λ), чем вклад от компоненты $A^0 \equiv \Phi$, содержащей шаровые функции более низкого порядка j.

Таким образом, полагаем

$$A^\mu = (\Phi, 0), \qquad \Phi = -\sqrt{\frac{j+1}{j}}\frac{4\pi^2}{\omega^{3/2}}\delta(|\mathbf{k}|-\omega)Y_{jm}(\mathbf{n})$$

($\mathbf{n} = \mathbf{k}/\omega$). Подставив это выражение в (46,1) и проинтегрировав по $|\mathbf{k}|$, получим

$$V_{fi} = -e\sqrt{\frac{j+1}{j}}\frac{\sqrt{\omega}}{2\pi}\int d^3x\cdot\rho_{fi}(\mathbf{r})\int do_{\mathbf{n}}e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}Y^*_{jm}(\mathbf{n}). \qquad (46,2)$$

Для вычисления внутреннего интеграла воспользуемся разложением (24,12), записав его в виде

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 4\pi\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} i^l g_l(kr)Y^*_{lm}\left(\frac{\mathbf{k}}{k}\right)Y_{lm}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right), \qquad (46,3)$$

где

$$g_l(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}}J_{l+1/2}(kr) \qquad (46,4)$$

(см. III (34,3)) [1]). Подставив это разложение в (46,2), получим

$$\int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}Y^*_{jm}(\mathbf{n})do_{\mathbf{n}} = 4\pi i^{-j}g_j(kr)Y^*_{jm}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right)$$

(остальные члены обращаются в нуль ввиду ортогональности шаровых функций). В силу условия $a/\lambda \ll 1$ в интеграле по d^3x будут играть роль лишь расстояния, для которых $kr \ll 1$. Поэтому можно заменить функции $g_j(kr)$ первыми членами их разложений по kr [2]):

$$g_j(kr) \approx \frac{(kr)^j}{(2j+1)!!}. \qquad (46,5)$$

---

[1]) Нормировка функций g_l такова, что их асимптотический вид при $kr \to \infty$

$$g_l(kr) \approx \frac{\sin(kr-\pi l/2)}{kr}. \qquad (46,4a)$$

[2]) Степень kr совпадает с порядком функции Y_{jm}, в произведении с которой выступает g_j. Тем самым оправдывается пренебрежение членами в $\mathbf{A}$, содержащими шаровые функции более высокого порядка.

В результате получим

$$V_{fi}=(-1)^{m+1}i^{j}\sqrt{\frac{(2j+1)(j+1)}{\pi j}}\,\frac{\omega^{j+1/2}}{(2j+1)!!}\,e\left(Q^{(э)}_{j,-m}\right)_{fi}, \tag{46,6}$$

где введены величины

$$\left(Q^{(э)}_{jm}\right)_{fi}=\sqrt{\frac{4\pi}{2j+1}}\int\rho_{fi}(\mathbf{r})\,r^{j}Y_{jm}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right)d^3x \tag{46,7}$$

(напомним, что $Y_{j,-m}=(-1)^{j-m}Y^{*}_{jm}$). Величины (46,7) называют *2^{j}-польными электрическими моментами перехода* системы по аналогии с соответствующими классическими величинами (II, § 41) [1]).

Для электрона во внешнем поле $\rho_{fi}=\psi^{*}_{f}\psi_{i}$, и тогда величины (46,7) вычисляются как матричные элементы от классической величины

$$Q^{(э)}_{jm}=\sqrt{\frac{4\pi}{2j+1}}\,r^{j}Y_{jm}.$$

В нерелятивистском (по скоростям частиц) случае момент перехода может быть в принципе вычислен аналогичным образом для любой системы N взаимодействующих частиц. При этом плотность перехода выражается через волновые функции системы в виде

$$\rho_{fi}(\mathbf{r})=\int\psi^{*}_{f}(\mathbf{r}_1,\ \ldots,\ \mathbf{r}_N)\,\psi_{i}(\mathbf{r}_1,\ \ldots,\ \mathbf{r}_N)\sum_{n=1}^{N}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n)\cdot d^3x_1\ldots d^3x_N, \tag{46,8}$$

где интеграл берется по всему конфигурационному пространству [2]).

Использованная нами волновая функция фотона соответствует (в координатном представлении) нормировке на δ-функцию по шкале ω, как и предполагается в формуле (44,2). Подставив в нее (46,6), получим вероятность Ej-излучения [3])

$$w^{(э)}_{jm}=\frac{2(2j+1)(j+1)}{j\left[(2j+1)!!\right]^2}\,\omega^{2j+1}e^2\left|\left(Q^{(э)}_{j,-m}\right)_{fi}\right|^2. \tag{46,9}$$

---

[1]) Мы определяем мультипольные моменты без множителя e в соответствии с тем, что и токи определены в этой книге без зарядового множителя.

[2]) Возможна ситуация, когда вероятность перехода обращается в нуль в силу приближенных правил отбора, справедливых лишь в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием электронов. В таком случае для получения отличного от нуля результата надо пользоваться волновыми функциями с релятивистской поправкой, учитывающей это взаимодействие.

[3]) На первый взгляд могло бы показаться, что в силу изотропии пространства полная вероятность испускания фотона не должна зависеть от значения m. Что это не так, легко понять, если заметить, что для испускания фотонов с различными значениями m должны быть различны конечные состояния системы (при заданном ее начальном состоянии); ср. ниже правило (46,16).

В частности, при $j=1$ имеем

$$w^{(э)}_{1m}=\frac{4\omega^3}{3}e^2\left|\left(Q^{(э)}_{1,-m}\right)_{fi}\right|^2. \tag{46,10}$$

Величины $Q^{(э)}_{1m}$ связаны с компонентами вектора электрического дипольного момента формулами

$$eQ^{(э)}_{10}=id_z,\quad eQ^{(э)}_{1,\pm1}=\mp\frac{i}{\sqrt{2}}\left(d_x\pm id_y\right). \tag{46,11}$$

Просуммировав (46,10) по значениям m, мы вернемся, как и следовало, к уже известной нам формуле (45,7) для полной вероятности дипольного излучения.

Угловое распределение мультипольного излучения определяется формулой (7,11). Нормируя ее на полную вероятность испускания w_{jm}, имеем

$$dw_{jm}=\left|\mathbf{Y}^{(э)}_{jm}(\mathbf{n})\right|^2 w_{jm}\,do=\frac{w_{jm}}{j(j+1)}\left|\nabla_{\mathbf{n}}Y_{jm}\right|^2 do. \tag{46,12}$$

В частности, для $j=1$

$$Y_{10}=i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\qquad Y_{1,\pm1}=\mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\cdot e^{\pm i\varphi},$$

где θ, φ — полярный угол и азимут направления $\mathbf{n}$ относительно оси z. Вычисляя градиент, найдем, что угловое распределение дипольного излучения с определенными значениями m дается выражениями

$$dw_{10}=w_{10}\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta\,do,\qquad dw_{1,\pm1}=w_{1,\pm1}\frac{3}{8\pi}\frac{1+\cos^2\theta}{2}do. \tag{46,13}$$

Их можно было бы, разумеется, получить и из формулы (45,6), положив в ней один раз (для $m=0$): $d_x=d_y=0$, $d_z=d$, а другой раз ($m=\pm1$): $d_y=\mp id_x=d/\sqrt{2}$, $d_z=0$.

Если порядок величины размеров системы (атома или ядра) есть a, то порядок величины электрических мультипольных моментов есть, вообще говоря, $Q^{(э)}_{jm}\sim a^j$. Вероятность же мультипольного излучения

$$w^{(э)}_{jm}\sim \alpha k(ka)^{2j}. \tag{46,14}$$

Увеличение степени мультипольности на 1 уменьшает вероятность излучения в отношении $\sim(ka)^2$.

Законы сохранения момента в четности приводят к определенным правилам отбора, ограничивающим возможные изменения состояния излучающей системы. Если начальный момент системы равен J_i, то после излучения фотона с моментом j момент системы может принимать лишь значения J_f, определяющиеся правилом сложения моментов ($\mathbf{J}_i - \mathbf{J}_f = \mathbf{j}$):

$$|J_i - J_f| \leqslant j \leqslant J_i + J_f. \tag{46,15}$$

При заданных значениях J_i и J_f тем же правилом (46,15) определяются возможные значения момента фотона j. Но поскольку вероятность излучения быстро убывает с увеличением j, то излучение происходит в основном с наименьшей возможной мультипольностью.

Проекции M_i и M_f моментов $\mathbf{J}_i$ и $\mathbf{J}_f$ вместе с проекцией m момента фотона удовлетворяют очевидному (из того же закона сложения моментов) правилу

$$M_i - M_f = m. \tag{46,16}$$

Четности P_i и P_f начального и конечного состояний излучающей системы должны удовлетворять условию $P_f P_ф = P_i$, где $P_ф$ — четность излученного фотона; поскольку четности могут иметь лишь значения ± 1, это условие можно записать также в виде

$$P_i P_f = P_ф. \tag{46,17}$$

Для фотона электрического типа $P_ф = (-1)^j$, так что правило отбора по четности для электрического мультипольного излучения:

$$P_i P_f = (-1)^j. \tag{46,18}$$

Правила отбора по полному моменту и по четности являются вполне строгими и должны соблюдаться при излучении любыми системами. Наряду с этими правилами могут существовать и другие, более жесткие, связанные с теми или иными особенностями структуры конкретных излучающих систем. Такие правила неизбежно имеют лишь более или менее приближенный характер; мы рассмотрим их в дальнейших параграфах этой главы.

Зависимость вероятности испускания от квантовых чисел m, M_i, M_f всецело определяется тензорным характером мультипольных моментов. Величины Q_{jm} с заданным j составляют сферический тензор ранга j. Зависимость его матричных элементов от указанных квантовых чисел дается формулой

$$|\langle n_f J_f M_f | Q_{j,-m} | n_i J_i M_i \rangle|^2 = \begin{pmatrix} J_f & j & J_i \\ M_f & m & -M_i \end{pmatrix}^2 |\langle n_f J_f \| Q_j \| n_i J_i \rangle|^2 \tag{46,19}$$

(см. III (107,6)), где буква n условно обозначает совокупность остальных, помимо J и M, квантовых чисел состояния системы. Стоящие в правой стороне равенства (46,19) приведенные матричные элементы от чисел m, M_i, M_f не зависят. Подставленная в (46,9) эта формула и определит искомую зависимость, которая оказывается пропорциональной

$$\begin{pmatrix} J_f & j & J_i \\ M_f & m & -M_i \end{pmatrix}^2$$

(при этом предполагается, конечно, что излучатель не находится во внешнем поле; тогда частота перехода ω не зависит от чисел M_i и M_f).

Просуммировав вероятность по всем значениям M_f (при заданном M_i), мы получим полную вероятность испускания фотона данной частоты с начального уровня системы n_iJ_i. В силу изотропии пространства очевидно, что эта величина не будет зависеть также и от начального значения M_i. Суммирование осуществляется с помощью формулы

$$\sum_{M_f} |\langle n_fJ_fM_f | Q_{l,-m} | n_iJ_iM_i\rangle|^2 = \frac{1}{2J_i+1} |\langle n_fJ_f \| Q_l \| n_iJ_i\rangle|^2 \quad (46,20)$$

(см. III (107,11)).

§ 47. Магнитное мультипольное излучение

Волновая функция фотона магнитного типа $A^\mu = (0, \mathbf{A})$, где $\mathbf{A}$ дается формулой (7,6). Подставив ее в (46,1), получим для матричного элемента перехода

$$V_{fi} = -e\frac{\sqrt{\omega}}{2\pi}\int d^3x \cdot \mathbf{j}_{fi}(\mathbf{r})\int do_{\mathbf{n}} \cdot e^{-i\mathbf{kr}}\mathbf{Y}^{(\text{м})*}_{jm}(\mathbf{n}). \quad (47,1)$$

Компоненты вектора $\mathbf{Y}^{(\text{м})}_{jm}$ выражаются согласно (7,16) через шаровые функции порядка j. Воспользовавшись снова разложением (46,3), получим для внутреннего интеграла

$$\int e^{-i\mathbf{kr}}\mathbf{Y}^{(\text{м})*}_{jm}(\mathbf{n})\, do_{\mathbf{n}} = 4\pi i^{-j} g_j(kr)\,\mathbf{Y}^{(\text{м})*}_{jm}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right),$$

и после подстановки g_j из (46,5)[1])

$$V_{fi} = -ei^{-j}\frac{2\omega^{j+\frac{1}{2}}}{(2j+1)!!}\int \mathbf{j}_{fi}(\mathbf{r})\, r^j\mathbf{Y}^{(\text{м})*}_{jm}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right) d^3x.$$

Сюда надо подставить согласно определению (7,4):

$$\mathbf{Y}^{(\text{м})}_{jm}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right) = \frac{1}{\sqrt{j(j+1)}}\,[\mathbf{r}\nabla Y_{jm}].$$

После этого преобразуем под интегралом

$$r^j\mathbf{j}_{fi}\,[\mathbf{r}\nabla Y^*_{jm}] = -[\mathbf{r}\mathbf{j}_{fi}]\,\nabla(r^jY^*_{jm})$$

---

[1]) Не смешивать ток $\mathbf{j}$ с моментом j!