По поводу этих формул надо, однако, сделать следующее замечание. В них использованы матричные элементы, вычисленные с волновыми функциями вида

$$\psi_{J\Omega M} = \mathrm{const}\cdot\chi_\Omega D^{(J)}_{\Omega M}(\mathbf{n})$$

(χ_Ω — волновая функция внутреннего состояния ядра). Эти функции отвечают определенным (по величине и знаку) значениям проекции момента на ось ζ. В ядрах же мы имеем дело с состояниями, обладающими лишь определенными четностью и величиной проекции момента (последнюю обычно и понимают под Ω). Поэтому при $\Omega\neq 0$ в качестве начальной и конечной волновых функций надо было бы взять комбинации вида

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{J\Omega M}\pm\psi_{J,-\Omega,M}\right),\qquad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{J'\Omega M'}\pm\psi_{J',-\Omega,M'}\right).$$

Произведения первых и вторых членов дадут прежнее значение матричного элемента квадрупольного момента. «Перекрестные» же произведения приведут к отличным от нуля интегралам, если $2\Omega\leqslant 2$ [1]). Поэтому формула (55,3), строго говоря, непригодна при $\Omega = 1/2$, 1; в этих случаях в вероятности перехода появляется дополнительный член, не выражающийся через среднее значение квадрупольного момента [2]).

Аналогично выводу формулы (55,3) для вероятности $M1$-перехода получается формула

$$w_{M1}(\Omega J\to\Omega,\ J-1) = \\ = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}\mu^2(2J-1)\begin{pmatrix} J-1 & 1 & J\\ -\Omega & 0 & \Omega\end{pmatrix}^2 = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}\mu^2\frac{J^2-\Omega^2}{J(2J+1)}, \qquad (55,4)$$

где μ — магнитный момент ядра (эта формула непригодна при $\Omega = 1/2$).

§ 56. Фотоэффект. Нерелятивистский случай

В § 49—52 мы рассматривали радиационные переходы (испускание или поглощение фотона) между атомными уровнями дискретного спектра. Фотоэффект отличается от такого процесса

---

[1]) Для матричных элементов 2^l-польных моментов в подынтегральные выражения войдут произведения вида

$$D^{(J')*}_{-\Omega M'}D^{(l)}_{q'q}D^{(J)}_{\Omega M}.$$

Интеграл по углам будет отличен от нуля при $q' = -2\Omega$, между тем как q' пробегает значения лишь от $-l$ до $+l$: поэтому должно быть $2\Omega\leqslant l$.

[2]) Фактически этот член дает существенную поправку лишь при $\Omega = 1/2$, когда связь между вращением и внутренним состоянием ядра особенно велика (см. об этом III, § 119).

поглощения фотона лишь тем, что конечное состояние относится к непрерывному спектру.

Сечение фотоэффекта может быть вычислено до конца в аналитическом виде для атома водорода или для водородоподобного иона (с зарядом ядра $Z \ll 137$).

В начальном состоянии имеем электрон на дискретном уровне $\varepsilon_i \equiv -I$ (I — потенциал ионизации атома) и фотон с определенным импульсом $\mathbf{k}$. В конечном состоянии электрон имеет импульс $\mathbf{p}$ (и энергию $\varepsilon_f \equiv \varepsilon$). Поскольку $\mathbf{p}$ пробегает непрерывный ряд значений, сечение фотоэффекта дается формулой

$$d\sigma = 2\pi |V_{fi}|^2 \delta(-I + \omega - \varepsilon) \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \tag{56,1}$$

(ср. (44,3)), причем волновая функция конечного состояния электрона предполагается нормированной на одну частицу в объеме $V = 1$. Таким же образом по-прежнему нормирована волновая функция фотона; для перехода к сечению $d\sigma$ вероятность dw должна быть при этом разделена на плотность потока фотонов (равную $c/V = c$), но в релятивистских единицах это не отражается на виде формулы (56,1).

Выберем, как и в (45,2), трехмерно поперечную калибровку фотона. Тогда

$$V_{fi} = -e\mathbf{A}\mathbf{j}_{fi} = -e\sqrt{4\pi}\frac{1}{\sqrt{2\omega}} M_{fi},$$

где обозначено

$$M_{fi} = \int \psi'^* (\boldsymbol{\alpha}\mathbf{e}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \psi \, d^3x \tag{56,2}$$

($\psi \equiv \psi_i$ и $\psi' \equiv \psi_f$ — начальная и конечная волновые функции электрона). Заменив в (56,1) $d^3p \to \mathbf{p}^2 d|\mathbf{p}|do = \varepsilon|\mathbf{p}|d\varepsilon\, do$ и проинтегрировав δ-функцию по $d\varepsilon$, перепишем эту формулу в виде

$$d\sigma = e^2 \frac{\varepsilon|\mathbf{p}|}{2\pi\omega} |M_{fi}|^2 do. \tag{56,3}$$

Мы произведем вычисления в двух случаях, различающихся значением энергии фотона: для $\omega \gg I$ и для $\omega \ll m$. Поскольку $I \sim me^4Z^2 \ll m$, эти две области частично перекрываются (при $I \ll \omega \ll m$), так что исследование этих случаев дает по существу полное описание фотоэффекта.

Начнем со случая

$$\omega \ll m. \tag{56,4}$$

При этом скорость электрона мала как в начальном, так и в конечном состоянии, так что по отношению к электрону задача — целиком нерелятивистская. Соответственно этому заменим в (56,2) $\boldsymbol{\alpha}$ нерелятивистским оператором скорости $\hat{\mathbf{v}} = -i\nabla/m$

(ср. § 45). Кроме того, можно перейти к дипольному приближению — положить $e^{i\mathbf{kr}} \approx 1$, т. е. пренебречь импульсом фотона по сравнению с импульсом электрона. Тогда

$$d\sigma = e^2 \frac{m\,|\mathbf{p}|}{2\pi\omega} |\mathbf{e}\mathbf{v}_{fi}|^2 do, \quad \mathbf{v}_{fi} = -\frac{i}{m} \int \psi'^* \nabla \psi \cdot d^3x. \tag{56,5}$$

Будем рассматривать фотоэффект с основного уровня атома водорода (или водородоподобного иона). Тогда

$$\psi = \frac{(Ze^2 m)^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-Ze^2 mr} \tag{56,6}$$

(в обычных единицах $me^2 \to 1/a_0$, где $a_0 = \hbar^2/me^2$ — боровский радиус).

В качестве же ψ' надо взять волновую функцию, асимптотическая форма которой содержит плоскую волну ($e^{i\mathbf{pr}}$) и наряду с ней сходящуюся сферическую (см. III, § 136, где такая функция обозначалась $\psi_{\mathbf{p}}^{(-)}$). В силу правила отбора по l переход из s-состояния возможен лишь в p-состояние (дипольный случай). Поэтому в разложении[1])

$$\psi_{\mathbf{p}}^{(-)} = \frac{1}{2p} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) e^{-i\delta_l} R_{pl}(r) P_l(\mathbf{n}\mathbf{n}_1) \tag{56,7}$$

($\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$, $\mathbf{n}_1 = \mathbf{r}/r$) достаточно оставить лишь член с $l = 1$. Опустив несущественные фазовые множители, получим

$$\psi' = \frac{3}{2p} (\mathbf{n}\mathbf{n}_1) R_{p1}(r). \tag{56,8}$$

С функциями ψ и ψ' из (56,6), (56,8) имеем

$$\mathbf{e}\mathbf{v}_{fi} = \frac{3 (Ze^2 m)^{5/2}}{2\sqrt{\pi}\, mp} \iint (\mathbf{n}\mathbf{n}_1)(\mathbf{n}_1\mathbf{e}) e^{-Ze^2 mr} R_{p1}(r)\, do_1 \cdot r^2 dr =$$

$$= \frac{\sqrt{2\pi}\,(Ze^2 m)^{5/2}}{pm} (\mathbf{n}\mathbf{e}) \int_0^{\infty} r^2 e^{-Ze^2 mr} R_{p1}(r)\, dr.$$

Согласно III (36,18) и III (36,24) радиальная функция (в принятых здесь единицах)

$$R_{p1} = \frac{\sqrt{8\pi}\, Ze^2 m}{3} \sqrt{\frac{1+\nu^2}{\nu\left(1 - e^{-2\pi\nu}\right)}}\, pre^{-ipr} F(2 + i\nu,\ 4,\ 2ipr),$$

где обозначено:

$$\nu = \frac{Ze^2 m}{p} \left(= \frac{Ze^2}{\hbar v}\right). \tag{56,9}$$

[1]) Ниже в этом параграфе p обозначает $|\mathbf{p}|$.

Нужный нам интеграл вычисляется с помощью формулы

$$\int_0^\infty e^{-\lambda z} z^{\gamma-1} F(\alpha, \gamma, kz)\, dz = \Gamma(\gamma)\, \lambda^{\alpha-\gamma} (\lambda - k)^{-\alpha}$$

(см. III (f, 3)). Заметив также, что

$$\left(\frac{\nu+i}{\nu-i}\right)^{i\nu} = e^{-2\nu \operatorname{arcctg} \nu},$$

получим

$$\mathbf{e}\mathbf{v}_{fi} = \frac{2^{7/2}\pi\nu^3 (\mathbf{n}\mathbf{e})}{\sqrt{p}\, m (1+\nu^2)^{3/2}} \frac{e^{-2\nu \operatorname{arcctg} \nu}}{\sqrt{1-e^{-2\pi\nu}}}.$$

Энергия ионизации с основного уровня атома водорода (или водородоподобного иона) $I = Z^2 e^4 m/2$. Поэтому

$$\omega = \frac{p^2}{2m} + I = \frac{p^2}{2m}(1+\nu^2). \qquad (56,10)$$

Учитывая это соотношение, пишем окончательное выражение для сечения фотоэффекта с испусканием электрона в элемент телесного угла do:

$$d\sigma = 2^7 \pi \alpha a^2 \left(\frac{I}{\hbar\omega}\right)^4 \frac{e^{-4\nu \operatorname{arcctg} \nu}}{1-e^{-2\pi\nu}} (\mathbf{n}\mathbf{e})^2\, do, \qquad (56,11)$$

где $a = \hbar^2/mZe^2 = a_0/Z$ (здесь и ниже — обычные единицы). Отметим, что угловое распределение фотоэлектронов определяется множителем $(\mathbf{n}\mathbf{e})^2$. Он максимален в направлениях, параллельных направлению поляризации падающих фотонов, и обращается в нуль в перпендикулярных вектору $\mathbf{e}$ направлениях, в том числе в направлении падения. Для неполяризованных фотонов формула (56,11) должна быть усреднена по направлениям $\mathbf{e}$, что сводится к замене

$$(\mathbf{n}\mathbf{e})^2 \to \frac{1}{2}[\mathbf{n}_0\mathbf{n}]^2,$$

где $\mathbf{n}_0 = \mathbf{k}/k$ (см. (45,4б)).

Интегрирование же формулы (56,11) по углам дает полное сечение фотоэффекта:

$$\sigma = \frac{2^9\pi^2}{3} \alpha a^2 \left(\frac{I}{\hbar\omega}\right)^4 \frac{e^{-4\nu \operatorname{arcctg} \nu}}{1-e^{-2\pi\nu}} \qquad (56,12)$$

(*M. Stobbe*, 1930).

Предельное значение σ при $\hbar\omega \to I$ (т. е. $\nu \to \infty$):

$$\sigma = \frac{2^9\pi^2}{3e^4} \alpha a^2 = \frac{2^9\pi^2}{3e^4} \frac{\alpha a_0^2}{Z^2} = 0{,}23 \frac{a_0^2}{Z^2} \qquad (56,13)$$

(в знаменателе $e = 2{,}71 \ldots !$). Как и должно быть для реакции с образованием заряженных частиц (см. III, § 147), сечение фотоэффекта вблизи его порога стремится к постоянному пределу.

Случай же $\hbar\omega \gg I$ (причем по-прежнему $\hbar\omega \ll mc^2$) отвечает борновскому приближению ($\nu = Ze^2/\hbar v \ll 1$). Формула (56,12) принимает вид

$$\sigma = \frac{2^8\pi}{3}\alpha a_0^2 Z^5 \left(\frac{I_0}{\hbar\omega}\right)^{7/2} \tag{56,14}$$

($I_0 = e^4m/2\hbar^2$ — энергия ионизации атома водорода).

Процессом, обратным фотоэффекту, является радиационная рекомбинация электрона с неподвижным ионом. Сечение этого процесса ($\sigma_{\text{рек}}$) можно найти по сечению фотоэффекта ($\sigma_{\text{ф}}$) с помощью принципа детального равновесия (III, § 144). Согласно этому принципу сечения процессов $i \to f$ и $f \to i$ (с двумя частицами в каждом из состояний i и f) связаны соотношением

$$g_i p_i^2 \sigma_{i\to f} = g_f p_f^2 \sigma_{f\to i},$$

где p_i, p_f — импульсы относительного движения частиц, а g_i, g_f — спиновые статистические веса состояний i и f. Учитывая также, что для фотона $g = 2$ (два направления поляризации), а статистический вес свободного электрона и иона равен статистическому весу основного состояния атома водорода, получаем для этого состояния

$$\sigma_{\text{рек}} = \sigma_{\text{ф}} \frac{2\mathbf{k}^2}{\mathbf{p}^2} \tag{56,15}$$

($\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ — импульс падающего электрона, $\mathbf{k}$ — импульс испускаемого фотона).

Задачи

1. Получить формулу (56,14) путем прямого использования борновского приближения в нерелятивистском случае.

Решение. В борновском приближении в качестве ψ' в формуле (56,5) надо писать просто плоскую волну $\psi' = e^{i\mathbf{pr}}$, а ψ — по-прежнему функция (56,6). Тогда

$$\mathbf{v}_{fi} = \mathbf{v}_{if} = \frac{1}{m}\int \psi\hat{\mathbf{p}}\psi'\, d^3x = \frac{\mathbf{p}}{m}\frac{(Ze^2m)^{3/2}}{\sqrt{\pi}}\left(e^{-Ze^2mr}\right)_{\mathbf{p}}.$$

Фурье-компонента дается формулой (57,6б), так что

$$\mathbf{v}_{fi} \approx 8\sqrt{\pi}\, p^{-3} m^{3/2} (Ze^2)^{5/2}\mathbf{n}.$$

Подставив в (56,5) и проинтегрировав по do, получим (56,14) (при этом, с достаточной точностью, $p^2/2m \approx \omega$).

2. Определить полное сечение радиационной рекомбинации быстрого нерелятивистского электрона ($I \ll mv^2 \ll mc^2$) с ядром (заряд $Z \ll 137$),

Решение. Сечение захвата на K-оболочку (главное квантовое число $n = 1$) получается подстановкой (56,14) в (56,15):

$$\sigma_1^{\text{рек}} = \frac{2^7\pi}{3} Z^5\alpha^3 a_0^2 \left(\frac{I_0}{\varepsilon}\right)^{5/2}$$

($\varepsilon = mv^2/2$ — энергия падающего электрона; $\hbar\omega \approx \varepsilon$). Из других состояний образующегося атома существенны лишь s-состояния: при вычислении матричного элемента в борновском приближении существенны значения волновой функции связанного состояния при малых r (как это будет видно из вычислений в § 57), а при $l > 0$ эти значения малы по сравнению со значениями функций с $l = 0$; при этом достаточно учитывать два первых члена разложения ψ по степеням r. Для состояний с $l = 0$ и произвольным n эти члены

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi}\, a^{3/2} n^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{a}\right),$$

т. е. содержат n лишь в виде общего множителя $n^{-3/2}$ (написанное выражение получается разложением функции III (36,13)). Поэтому полное сечение рекомбинации

$$\sigma^{\text{рек}} = \sum_{n=1}^{\infty} \sigma_n^{\text{рек}} = \sigma_1^{\text{рек}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} = \zeta(3)\, \sigma_1^{\text{рек}}$$

(значение ζ-функции: $\zeta(3) = 1{,}202$).

§ 57. Фотоэффект. Релятивистский случай

Обратимся к случаю

$$\omega \gg I. \tag{57,1}$$

При этом также $\varepsilon = \omega - I \gg I$, и потому влияние кулонова поля ядра на волновую функцию фотоэлектрона (ψ') может быть учтено с помощью теории возмущений. Пишем ψ' в виде

$$\psi' = \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}} \left(u' e^{i\mathbf{pr}} + \psi^{(1)}\right). \tag{57,2}$$

Фотоэлектрон может быть релятивистским; поэтому невозмущенная функция в (57,2) написана в виде релятивистской плоской волны (23,1).

Хотя в начальном состоянии электрон нерелятивистский, в его волновой функции ψ тем не менее должна быть (по выясняющимся ниже причинам) учтена релятивистская поправка ($\sim Ze^2$). Такая функция дается формулой (см. задачу к § 39)

$$\psi = \left(1 - \frac{i}{2m} \gamma^0 \boldsymbol{\gamma}\nabla\right) \frac{u}{\sqrt{2m}} \psi_{\text{нр}}, \tag{57,3}$$

где $\psi_{\text{нр}}$ — нерелятивистская функция связанного состояния (56,6), а u — биспинорная амплитуда покоящегося электрона, нормированная принятым нами условием $\bar{u}u = 2m$.