Формула (103,10) выражает закон сохранения импульса при взаимодействии фотона со свободным электроном. Кроме того, при переходе имеет место закон сохранения энергии. Таким образом, должны одновременно выполняться равенства

$$\boldsymbol{p}_2 = \boldsymbol{p}_1 + \hbar \boldsymbol{k}, \qquad (103,11)$$

$$E_2 = E_1 + \hbar\omega. \qquad (103,12)$$

Нетрудно видеть, что уравнения (103,11) и (103,12) несовместны. Аналогичное заключение относится, конечно, и к случаю поглощения.

Для того чтобы законы сохранения энергии и импульса могли выполняться одновременно, необходимо участие третьего тела, которому и передается избыток импульса. В случае атомных электронов таким телом может служить ядро атома.

§ 104. Дипольные переходы в атомных системах

Матричный элемент для процесса излучения фотона (103,2) в большинстве случаев может быть существенно упрощен. Обычно длина волны испускаемого фотона значительно больше линейных размеров той области пространства, в которой волновые функции электрона ψ_1 и ψ_2 заметно отличны от нуля.

Пусть, например, электрон движется в атоме, эффективный радиус которого равен a. Тогда волновые функции начального и конечного состояний весьма малы вне области радиуса a. Энергия электрона в поле ядра с эффективным зарядом Z^* по порядку величины равна $\frac{Z^*e^2}{a}$. Того же порядка и изменение энергии атома ΔE при переходе, а следовательно, и энергия излучаемого фотона. Тогда длина излучаемой волны $\lambda \approx \frac{c}{\omega} \approx \frac{\hbar c}{\hbar\omega} \approx \frac{\hbar c a}{Z^* e^2}$. Отношение размеров атома к длине волны по порядку величины равно

$$\frac{a}{\lambda} \approx \frac{Z^* e^2}{\hbar c} \approx \frac{Z^*}{137}.$$

Для внешних электронов $Z^* \approx 1$ и длина волны существенно больше размеров атома. В случае рентгеновского излучения, возникающего при переходах в K-оболочке тяжелых атомов, это приближение оказывается уже недостаточным. При $\lambda \gg a$ показатель экспоненциальной функции, стоящей под знаком интеграла в (103,2), очень мал в пределах эффективной области интегрирования и поэтому множитель $\bar{e}^{i\boldsymbol{kr}}$ можно заменить на единицу.

Вероятность перехода с излучением (103,7) перепишется при этом в виде

$$dW = \frac{e^2\omega}{m^2 2\pi\hbar c^3} |(p_e)_{12}|^2 (n_k + 1)\, d\Omega. \tag{104,1}$$

Здесь $\hat{p}_e$ — оператор проекции импульса частицы на направление поляризации испущенного кванта.

Матричный элемент оператора импульса можно выразить через матричный элемент координаты. Согласно (31,7) и (49,5), имеем

$$(\boldsymbol{p})_{12} = m(\boldsymbol{v})_{12} = m(\dot{\boldsymbol{r}})_{12} = \frac{im}{\hbar}(E_1 - E_2)(\boldsymbol{r})_{12} = -\frac{im}{e}\omega(\boldsymbol{d})_{12}, \tag{104,2}$$

где $\boldsymbol{d}$ — дипольный момент частицы. Подставляя (104,2) в (104,1), получаем

$$dW = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |(d_e)_{12}|^2 (n_k + 1)\, d\Omega, \tag{104,3}$$

d_e — проекция вектора дипольного момента частицы на направление поляризации. Мы видим, что вероятность перехода (104,3) зависит от матричного элемента дипольного момента частицы и поэтому такие переходы называются дипольными, а излучение — дипольным излучением. Если обозначить угол между $(\boldsymbol{d})_{12}$ и направлением поляризации излучения через θ, то выражение (104,3) можно переписать как

$$dW = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |(\boldsymbol{d})_{12}|^2 \cos^2\theta\, (n_k + 1)\, d\Omega. \tag{104,4}$$

Просуммируем последнее выражение по поляризациям кванта. За независимые направления поляризации выбираем поляризацию в плоскости $\boldsymbol{d}$, $\boldsymbol{k}$ и поляризацию в направлении, перпендикулярном этой плоскости. Выражение (104,4) при этом приводится к виду

$$dW = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |\boldsymbol{d}_{12}|^2 (n_k + 1) \sin^2\vartheta\, d\Omega, \tag{104,5}$$

где ϑ — угол между вектором $\boldsymbol{d}_{12}$ и направлением распространения излучения $\boldsymbol{k}$.

Интенсивность излучения в единицу времени в элемент телесного угла $d\Omega$ получится при умножении (104,5) на энергию фотона $\hbar\omega$. Для спонтанного излучения имеем

$$J\, d\Omega = \frac{\omega^4}{2\pi c^3} |\boldsymbol{d}_{12}|^2 \sin^2\vartheta\, d\Omega\,. \tag{104,6}$$

Проинтегрировав по углам, найдем полное спонтанное излучение в единицу времени

$$\frac{dE}{dt} = \frac{4\omega^4}{3c^3} |\boldsymbol{d}_{12}|^2\,. \tag{104,7}$$

Найденное выражение весьма сходно с классической формулой для интенсивности дипольного излучения (см. (27,9) ч. I). Различие между классической и квантовой формулами заключается лишь в том, что усредненный квадрат дипольного момента $\overline{\boldsymbol{d}^2}$, входящий в классическое выражение, нужно заменить на соответствующий матричный элемент (удвоенный) $2|\boldsymbol{d}_{12}|^2$.

Аналогичным образом можно рассмотреть дипольные переходы при поглощении света. Полагая в (103,1) $e^{i\boldsymbol{kr}} = 1$ и учитывая (104,2), получаем для вероятности перехода в единицу времени

$$dW = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |\boldsymbol{d}_{21}|^2 \cos^2\theta n_{\boldsymbol{k}}\, d\Omega. \tag{104,8}$$

Усредняя это выражение по всем ориентациям вектора $\boldsymbol{d}$ по отношению к направлению падающего излучения, находим

$$\overline{\cos^2\theta} = \frac{1}{4\pi}\int \cos^2\theta\, d\Omega = \frac{1}{3}. \tag{104,9}$$

Выражая $n_{\boldsymbol{k}}$ через интенсивность падающего излучения $J_0(\omega)$ и умножая (104,8) на $\hbar\omega$, найдем энергию, поглощаемую за единицу времени

$$J\, d\Omega = \frac{4\pi^2}{3}\frac{e^2}{\hbar c}\omega |\boldsymbol{r}_{21}|^2 J_0(\omega)\, d\Omega. \tag{104,10}$$

До сих пор мы рассматривали поглощение и излучение фотона одним электроном. Если поглощающая или излучающая система содержит несколько электронов, то, пренебрегая взаимодействием между ними, можно считать, что формулы (104,10), (104,5) останутся справедливыми, если только заменить в них дипольный момент электрона суммой дипольных моментов всех электронов.

§ 105. Квадрупольное и магнитное дипольное излучения

Матричные элементы дипольного перехода получаются из общего выражения (103,2) при замене экспоненциальной функции $e^{-i\boldsymbol{kr}}$ единицей. Может оказаться, однако, что матричный элемент дипольного перехода обращается в нуль, тогда как точный матричный элемент (103,2) отличен от нуля. В этом случае следует разложить экспоненту $e^{-i\boldsymbol{kr}}$ в ряд, выписав старшие члены разложения. При этом вероятность излучения будет отлична от нуля, хотя и существенно меньше вероятности дипольного излучения. По этой причине такие переходы называются запрещенными. Вероятность излучения, обусловленная следующим членом разложения, будет иметь вид

$$dW = \frac{e^2\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |(r_e(\boldsymbol{kr}))_{21}|^2 (n_{\boldsymbol{k}} + 1)\, d\Omega. \tag{105,1}$$