Май 2004 г. **УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК** *Том 174, № 5*

ПИСЬМА В РЕДАКЦИЮ

Формула Зоммерфельда и теория Дирака

Я.И. Грановский

Удивительное совпадение формулы тонкой структуры А. Зоммерфельда и П. Дирака оказывается результатом ошибки первого автора.

PACS numbers: **01.65.+g**, 03.65.Pm, 03.65.Sq

Тонкая структура спектральных линий атома водорода была открыта А. Майкельсоном в 1887 г., когда он оставил безуспешные попытки обнаружить "эфирный ветер" и, обратившись к спектроскопии, установил [1], что головная линия серии Бальмера H_α представляет собой дублет. В те далекие времена, когда электрон не был еще открыт, ни природа излучения, ни, тем более, ее тонкие эффекты не имели никакого объяснения.

Модель атома, построенная Н. Бором в 1913 г. [2], предложила такое объяснение ("атом излучает при переходе между стационарными состояниями"), но дублетность по-прежнему оставалась непонятной, так как вследствие вырождения уровни Бора выглядели синглетными.

Еще через три года А. Зоммерфельд показал [3], что в релятивистской теории энергетические уровни расщепляются на несколько подуровней и при переходах возникает целая система спектральных линий — тонкая структура.

Конспективно его рассуждения таковы: возьмем правила квантования так называемых фазовых интегралов [1]

$$\oint p_\varphi\,\mathrm{d}\varphi = n_\varphi h\,, \qquad \oint p_r\,\mathrm{d}r = n_r h \tag{1}$$

(r, φ — полярные координаты в плоскости орбиты электрона; p_r, p_φ — соответствующие обобщенные импульсы: радиальная компонента импульса и орбитальный момент), затем с помощью релятивистского соотношения между энергией и импульсом

$$c^2\left(p_r^2 + \frac{L^2}{r^2}\right) + m^2c^4 = \left(E + \frac{e^2}{r}\right)^2, \tag{2}$$

найдем радиальный импульс

$$p_r = \sqrt{\frac{E^2 - m^2c^4}{c^2} + \frac{2Ee^2}{rc^2} + \frac{e^4/c^2 - L^2}{r^2}} \tag{3}$$

и вычислим радиальный интеграл

$$I = \oint \sqrt{A + \frac{B}{r} + \frac{D}{r^2}}\,\mathrm{d}r$$

методом вычетов: $I = 2\pi\mathrm{i}\left(B/2\sqrt{A} + \sqrt{D}\right)$. Это даст

$$2\pi\mathrm{i}\left(\frac{Ee^2}{c\sqrt{E^2 - m^2c^4}} + \sqrt{\frac{e^4}{c^2} - L^2}\right) = n_r h\,. \tag{4}$$

Полагая вслед за Зоммерфельдом

$$L^2 = p_\varphi^2 = n_\varphi^2 \hbar^2\,, \tag{5}$$

найдем

$$E = mc^2\left[1 + \left(\frac{\alpha}{n_r + \gamma}\right)^2\right]^{-1/2}, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}\,, \quad \gamma = \sqrt{n_\varphi^2 - \alpha^2}\,. \tag{6}$$

Разлагая по степеням постоянной тонкой структуры $\alpha = 1/137$, получим

$$E_{n, n_\varphi} = mc^2 - \frac{\mathfrak{R}\mathrm{y}}{n^2} + \frac{\alpha^2\,\mathfrak{R}\mathrm{y}}{n^4}\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{n_\varphi}\right) + \ldots, \quad n = n_r + n_\varphi\,. \tag{7}$$

Первое слагаемое — это энергия покоя, второе — энергия связи по Бору (n — главное квантовое число, $\mathfrak{R}\mathrm{y} = mc^2\alpha^2/2$ — постоянная Ридберга), третье — релятивистская поправка. Благодаря своей зависимости от n_φ эта поправка снимает боровское вырождение.

Второй уровень атома водорода расщепляется на два подуровня, соответствующих $n_\varphi = 1$ и 2 (2S и 2P в современных обозначениях), причем $E_{22} - E_{21} = \alpha^2\,\mathfrak{R}\mathrm{y}/16$. Легко проследить (см. (2)), что расщепление обусловлено поправкой к потенциальной энергии, равной $(e^2/r)^2$. Она же вызывает поворот перигелия орбиты.

Почти 12 лет формула Зоммерфельда считалась единственно правильной — уже после создания квантовой механики расчеты, основанные на релятивист-

[1] Фазовый интеграл равен площади, охватываемой контуром интегрирования, так что по сути дела уравнения (1) — это условия разбиения фазового пространства на ячейки объемом h^D, где D — число степеней свободы. Эти условия впервые использовал Вильсон [4]; позже Эренфест обосновывал их с помощью гипотезы об адиабатической инвариантности [5].

Я.И. Грановский. Институт физики горного дела НАНУ,
83114 Донецк, ул. Р. Люксембург 72, Украина
Тел. +380-504-786284
E-mail: gran@telenet.dn.ua

Статья поступила 13 апреля 2004 г.

ском волновом уравнении Клейна – Гордона (не учитывающем спина), давали формулу

$$\Delta E_{nl}^{(\mathrm{KG})} = \frac{mc^2\alpha^4}{2n^4}\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{l+1/2}\right), \qquad (8)$$

которая приводит к расщеплению $\alpha^2\,\Re\mathrm{y}/6$, превышающему правильное в $8/3$ раза[2].

Открытие спина повлияло на теорию Зоммерфельда двояко: во-первых, в связи с появлением третьего квантового числа j изменилась классификация уровней (в частности, второй уровень представлен тремя подуровнями — $2\mathrm{S}_{1/2}$, $2\mathrm{P}_{1/2}$, $2\mathrm{P}_{3/2}$) и, во-вторых, потребовалось учесть спин-орбитальное взаимодействие. И тут произошло маленькое чудо: Гайзенберг и Иордан [7], а также Дарвин [8] показали, что это взаимодействие вместе с бесспиновой частью $\Delta E_{nl}^{(\mathrm{KG})}$ приводит к формуле

$$\Delta E_{nj} = \frac{mc^2\alpha^4}{2n^4}\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j+1/2}\right), \qquad (9)$$

которая дает тот же ответ, что и "старая" формула Зоммерфельда (7).

В самом деле, при сложении орбитального момента со спиновым j пробегает значения от $l_{\min} + 1/2 = 1/2$ до $l_{\max} + 1/2 = n - 1/2$, так что $1 \leqslant j + 1/2 \leqslant n$. Поскольку этот спектр совпадает со спектром значений n_φ — оба изменяются от 1 до n — то численные результаты обеих теорий одинаковы[3].

Более того, в начале 1928 г. П. Дирак, пользуясь последовательной квантово-релятивистской теорией, учитывающей спин, получил (в рамках теории возмущений[4]) ту же формулу (9). В том же году Дарвин [10] и Гордон [11] точно решили уравнение Дирака с кулоновским полем и дали формулу для энергетических уровней

$$E = mc^2\left[1 + \left(\frac{\alpha}{n_r + \gamma_\mathrm{D}}\right)^2\right]^{-1/2}, \qquad \gamma_\mathrm{D} = \sqrt{(j+1/2)^2 - \alpha^2}\,. \qquad (10)$$

Как видно, она имеет тот же вид, что и формула (6) Зоммерфельда, но принципиально отличается от нее заменой n_φ на $j + 1/2$.

Возникла парадоксальная ситуация: эклектическая теория каким-то образом оказалась эквивалентной последовательной теории Дирака. Этого не должно быть, хотя бы потому, что Зоммерфельд не учитывал спин-орбитальное взаимодействие — релятивистский эффект того же порядка. В цитированной работе он также пытался объяснить аномальный эффект Зеемана, но без успеха — это невозможно без учета спина.

[2] Фольклор повествует [6], что впервые эту формулу получил Шрёдингер... Написав осенью 1925 г. релятивистское уравнение с кулоновским полем, он увидел, что результат дает неправильную тонкую структуру и отложил его в сторону. Однако, спустя некоторое время, он понял, что и нерелятивистский расчет имеет право на жизнь и опубликовал его в январе 1926 г. Правда, без упоминания о релятивизме...

[3] Отметим, однако, разнобой в определениях: у Зоммерфельда тонкая структура — это расщепление уровней 2S и 2P, отличающихся четностью, а у Дирака $2\mathrm{P}_{1/2}$ и $2\mathrm{P}_{3/2}$ одинаковой четности. Правда, уровни $2\mathrm{S}_{1/2}$ и $2\mathrm{P}_{1/2}$ вырождены, но только с точностью до радиационных поправок: лэмбовский сдвиг уровня $2\mathrm{S}_{1/2}$ вверх как раз и был открыт при изучении тонкой структуры [9].

[4] Дирак признавался, что он поступил так, опасаясь, что высшие приближения испортят согласие с экспериментом, как это было в истории со Шрёдингером (см. сноску 2).

В литературе бытуют разные мнения относительно причин указанного совпадения: одни [12] считают, что имеет место компенсация спинового вклада и волновых эффектов. Но это неверно — волновые свойства косвенно учтены в работе Зоммерфельда: когда он писал правила квантования (1), он фактически работал в квазиклассическом приближении. Поэтому спину попросту не с чем компенсироваться. Другие считают его "совершенно случайным" — так, в частности заключает свой обзор ситуации Вайнберг [13]; он показывает, что сумма $\Delta E_{nl}^{(\mathrm{KG})} + \Delta E_{\text{sp-orb}}$ совпадает с ΔE_{Somm}, но оставляет этот факт без анализа. В более старых книгах [14] обычно критикуют теорию Зоммерфельда за неправильные классификацию уровней и правила отбора, но, пользуясь формулой (7), умалчивают о ее "странности". Гайзенберг называет совпадение "чудом" и выражает надежду: "Было бы замечательно исследовать, идет ли речь о чуде или к этой формуле приводит теоретико-групповой подход" [15]. Радикальную попытку решения предпринял Биденхарн [16]: он заметил, что, перейдя во вращающуюся систему координат, можно провести аналогию между классическим решением Зоммерфельда и квантовым — Дирака. К сожалению, он забыл преобразовать гамильтонову функцию, что лишает эту попытку ценности.

Вместе с тем ответ довольно прост: совпадение основано на ошибке Зоммерфельда[5] — он неправильно заменил квадрат орбитального момента L^2 в формуле (4) на $L_z^2 = n_\varphi^2\hbar^2$. В квазиклассическом приближении правильным является $L^2 = (l+1/2)^2\hbar^2$. Значит, если бы Зоммерфельд делал все "по науке", то вместо n_φ у него вошло бы $l + 1/2$ и расщепление оказалось бы равным $\alpha^2\,\Re\mathrm{y}/6$ — почти втрое большим. Поступив так, он пришел бы к ответу Шрёдингера – Клейна – Гордона, как и должно быть в бесспиновом случае.

Правильный же ответ получился благодаря глубоко спрятанной ошибке!

Список литературы

1. Michelson A A *Philos. Mag.* **24** 466 (1887); **31** 338 (1891)
2. Bohr N *Philos. Mag.* **26** 1 (1913)
3. Sommerfeld A *Phys. Z.* **17** 491 (1916); *Ann. Phys.* (Leipzig) **51** 1 (1916); Зоммерфельд А *Строение атома и спектры* Т. 1 (М.: ГИТТЛ, 1956)
4. Wilson W *Philos. Mag.* **29** 795 (1915)
5. Ehrenfest P *Ann. Phys.* (Leipzig) **51** 327 (1916)
6. Dirac P A M *Sci. Am.* **208** (5) 45 (1963)
7. Heisenberg W, Jordan P *Z. Phys.* **37** 263 (1926)
8. Darwin C G *Proc. R. Soc. London Ser. A* **116** 22 (1927)
9. Lamb W E (Jr.), Retherford R C *Phys. Rev.* **72** 241 (1947)
10. Darwin C G *Proc. R. Soc. London Ser. A* **118** 227 (1928)
11. Gordon W *Z. Phys.* **48** 11 (1928)
12. Yourgrau W, Mandelstam S *Variational Principles in Dynamics and Quantum Theory* 3rd ed. (Philadelphia: Saunders, 1968)
13. Вайнберг С *Квантовая теория поля* Т. 1 (М.: Физматлит, 2003)
14. Бриллюэн Л *Атом Бора* (М.-Л.: ОНТИ, 1935); Де Бройли Л *Магнитный электрон* (М.-Л.: ОНТИ, 1936)
15. Heisenberg W *Phys. Blatt.* **24** 530 (1968) [Перевод на русский язык в сб.: Зоммерфельд А *Пути познания в физике* (М.: Наука, 1973)]
16. Biedenharn L C *Phys. Rev.* **126** 845 (1962); Biedenharn L C, Swamy N V V J *Phys. Rev.* **133** B1353 (1964)

[5] В квантовой теории, в отличие от классической, плоскости орбиты не существует и квадрат момента не сводится к квадрату L_z: хотя компонента L_z продолжает сохраняться, но вместе с ней существуют L_x, L_y, квадраты которых отличны от нуля.