

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

ОБ ОРБИТАХ ВОДОРОДНОГО ЭЛЕКТРОНА В ОДНОРОДНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

*Ю.М. Копнин, М.Ю. Копнин**(Статья поступила 1.10. 92 г.)*

В учебной литературе по атомной физике, а именно, в разделах старой квантовой теории с ее классическими представлениями о траекториях материальных точек традиционно фигурируют два наиболее простых примера пространственного квантования орбит водородного электрона в однородных электрическом и магнитном полях (линейный эффект Штарка и нормальный эффект Зеемана), на которых наглядно демонстрируются процедура квантования возмущенных энергетических уровней атома и соответствующая картина расщеплений его спектральных линий в этих простейших случаях [1—4]. Обе задачи исследуются методами классической механики, но различаются (исходя из свойств возмущающихся полей) выбором исходных координатных систем и, как следствие, формой представления решений для траекторных параметров электрона, так, в случае электрического возмущающего поля наиболее подходящей оказалась система параболических координат с экваториальным углом относительно направления поля (ввиду удобства разделения переменных), в случае же магнитного возмущающего поля — сферические координаты, при этом наиболее просто осуществляется переход к орбитальным переменным (и, как следствие, к орбитальным квантовым числам) в подвижных координатных осях, совершающих вместе с плоскостью возмущенной орбиты электрона вековую регулярную прецессию относительно направления поля [1—4]. Данная замечательная особенность решения второй задачи (обусловленная в современной трактовке общими свойствами симметрии магнитного поля и поля вращения) позволила, во-первых, дать исключительно простую и наглядную геометрическую интерпретацию возмущенному движению электрона в привычных терми-

нах орбитальной динамики и, во-вторых, использовать (в силу адиабатического принципа) обычную схему квантования эллиптических орбит в прецессирующих координатных плоскостях при оценке смещений уровней полной энергии электрона. Что касается решения первой задачи, то оно, при всей его математической добротности, лишено подобной наглядности и позволяет сделать лишь общие заключения о характере возмущенной орбиты внутри определенных границ [1]. И хотя обе задачи в их классическом виде уже "принадлежат истории" (но по-прежнему выполняют свою учебную роль для студентов по предмету атомной физики), с чисто методической и общепознавательной точек зрения вполне естественно попытаться исследовать первую задачу, как и вторую, также в орбитальных переменных, с тем чтобы сравнить полученное решение, с одной стороны, с уже известным решением в параболических координатах (как с эталоном), а с другой — с решением второй задачи (что у них общего и в чем принципиальное различие). Поводом к проведению такого исследования послужила статья одного из авторов настоящей заметки "Эволюция орбиты спутника под влиянием малой возмущающей силы, постоянной по величине и направлению" [5], в которой как раз в орбитальных переменных рассмотрена, по существу однотипная задача небесной механики. Дело в том, что общее решение данной задачи включает два чрезвычайно простых частных решения (как раз представляющие здесь непосредственный интерес), согласно которым при выполнении определенных начальных условий возмущенная орбита спутника (а в нашем случае — электрона), сохраняя в первом приближении (т.е. с точностью до вековых возмущений второго порядка малости) свою форму,

i, ε, ω , как и большая ось орбиты $2a$, в дальнейшем остаются неизменными, т.е.

$$\sin i = \varepsilon \equiv \varepsilon_0 = \sin i_0, \quad (1.1)$$

$$\omega \equiv \omega_0 = \pm 90^\circ,$$

а плоскость орбиты совершает регулярную прецессию относительно оси OZ с постоянной средней (за период T_1 одного оборота по орбите) угловой скоростью $d\Omega/dt = \pm(3/2)(\varepsilon/T_1) \text{sign}(\cos i_0)$ или, с учетом параметров электрона в системе единиц Гаусса,

$$d\Omega/dt = \pm(3/2)E(a/m_0Z)^{1/2} \text{sign} \cos i_0, \quad (1.2)$$

где знаки $+$ и $-$ соответствуют начальным значениям $\omega_0 = \pm 90^\circ$.

Данные квазистационарные орбиты внешне напоминают аналогичные возмущенные орбиты при нормальном эффекте Зеемана с тем, однако, принципиальным отличием, что здесь их эксцентриситеты и наклоны не являются независимыми друг от друга (а связаны между собой соотношением $\varepsilon = \sin i$) и, кроме того, угловая скорость прецессии орбиты зависит от длины ее большой полуоси a (при нормальном эффекте Зеемана она для всех орбит одна и та же [1–4]).

2. Представленные в форме (1.1), (1.2) решения позволяют элементарно просто рассчитать смещения уровней полной энергии электрона на основе адиабатического принципа аналогично тому, как это обычно делается при изложении нормального эффекта Зеемана в старой квантовой теории [1–3]. В самом деле, введем подвижные координатные системы, прецессирующие относительно оси OZ неподвижной системы $O\xi\eta\zeta$ вместе с допустимыми орбитами из семейств (1.1), (1.2), так что экваториальные угловые координаты электрона (χ — в неподвижной системе, ψ — в подвижной) связаны соотношением $\chi = \psi + \Omega$ (см. рисунок). Если теперь составить, как обычно, выражения для кинетической энергии T электрона при отсутствии электрического поля ($T(r, \theta, \dot{r}, \dot{\theta}, \dot{\psi})$ или $T(0)$) и при наличии поля ($T(r, \theta, \dot{r}, \dot{\theta}, \dot{\chi})$ или $T(E)$), то с точностью до членов второго порядка малости относительно $d\Omega/dt$ будем иметь

$$\Delta T = T(E) - T(0) = p_\psi d\Omega/dt, \quad (2.1)$$

где p_ψ — импульс электрона, отвечающий координате ψ в прецессирующей системе отсчета. С учетом выражения (1.2) для $d\Omega/dt$, а также условий квантования импульса p_ψ и большой полуоси орбиты a ($p_\psi = (h/2\pi)n_\psi$, $a = h^2n^2/4\pi^2m_0Ze^2$, n и n_ψ — главное и экваториальное квантовые числа, h —

постоянная Планка) получим (согласно (2.1)) следующее выражение для изменения кинетической энергии

$$\Delta T = \pm 3h^2En|n_\psi|(8\pi^2m_0Ze)^{-1}, \quad (2.2)$$

где знаки $+$ и $-$ соответствуют начальным значениям $\omega_0 = +90^\circ$ и $\omega_0 = -90^\circ$.

Что касается изменения потенциальной энергии электрона ΔV , то его можно вычислить либо путем осреднения по времени выражения $\Delta V = Ee\zeta$ (на интервале, соответствующем одному обороту электрона по орбите) с учетом уравнений возмущенного движения, либо (что проще и дает тот же результат) путем составления скалярного произведения $\Delta V = -(\mathbf{E}, \mathbf{P})$ векторов напряженности электрического поля \mathbf{E} и электрического диполя \mathbf{P} , равного по величине $(3/2)e\mathbf{e}a$ и направленного от "центра тяжести" распределения заряда электрона по эллиптической орбите к ядру [1]. С учетом соотношений $\sin^2 i = \varepsilon^2 = 1 - (n_\varphi/n)^2 = 1 - \cos^2 i = 1 - (n_\psi/n_\varphi)^2$ и, как следствие, равенства $n_\varphi^2 = n|n_\psi|$ (n_φ — азимутальное квантовое число) для ΔV получим выражение

$$\Delta V = \mp 3h^2En(n - |n_\psi|)(8\pi^2m_0Ze)^{-1}, \quad (2.3)$$

где знак приращения обратен знаку начального значения ω_0

Отметим особо случай круговой орбиты ($\varepsilon = 0$, $i_0 = 0^\circ$ или $i_0 = 180^\circ$), которая согласно [5] устойчива к воздействию возмущающего поля и в первом приближении (т.е. с точностью до вековых возмущений второго порядка малости) свою энергию не меняет ($\Delta T = \Delta V = 0$, см. также [2]). Заметим также, что лишь в этом случае экваториальное квантовое число достигает своего максимального абсолютного значения $|n_\psi| = n$.

Таким образом, с учетом (2.2), (2.3), а также упомянутого случая $\varepsilon = 0$, изменение полной энергии ΔW электрона будет определяться формулой

$$\begin{aligned} \Delta W &= \pm 3h^2n(n - 2|n_\psi|)(8\pi^2m_0Ze)^{-1} \text{ при } |n_\psi| < n, \\ &= 0 \text{ при } |n_\psi| = n, \end{aligned} \quad (2.4)$$

где знак $+$ соответствует тому случаю, когда геометрический центр эллиптической орбиты лежит выше экваториальной плоскости $O\xi\eta$ ($\omega_0 = -90^\circ$) и знак $-$, когда — ниже ($\omega_0 = +90^\circ$) (см. рисунок).

3. Если теперь попытаться применить формулу (2.4) для расчета сдвигов частот $\Delta\nu$ бальмеровых спектральных линий водорода ($\Delta\nu = (\Delta W_1 - \Delta W_2)/h$) с использованием лишь целочисленных значений $|n_\psi|$ и традиционных правил квантовых

переходов ($\Delta n_\psi = 0$ для π -компонент спектра и $\Delta n_\psi = \pm 1$ для σ -компонент), то результаты не будут соответствовать классической картине расщеплений [1–3]. Оказалось, что такое соответствие будет полным, если в формуле (2.4) наряду с целыми значениями n_ψ использовать также и его полуцелые значения ($1/2 \leq |n_\psi| \leq n$) и, кроме того, соответственно изменить правило отбора для n_ψ :

$$\Delta |n_\psi| = 0 \text{ для } \pi\text{-компонент спектра,} \quad (2.5)$$

$$\Delta |n_\psi| = \pm 1/2 \text{ для } \sigma\text{-компонент.}$$

В качестве иллюстрации в табл. I, II приведены смещения частоты (Δ) бальмеровской линии H_α , вычисленные по этим правилам в единицах постоянной $A = 3hE/8\pi^2 m_0 e$ (звездочкой в таблицах отмечено значение $\Delta W_2 = 0$, соответствующее круговой орбите в конечном состоянии $n = 2$).

Таблица I. π -компоненты H_α ($n_1 = 3, n_2 = 2$)

$ n_{\psi 1} \rightarrow n_{\psi 2} $	$\pm 3(3 - 2 n_{\psi 1})$	$\pm 2(2 - 2 n_{\psi 2})$	Δ
1/2 \rightarrow 1/2	± 6	± 2	$\pm 4, \pm 8$
1 \rightarrow 1	± 3	0	± 3
3/2 \rightarrow 3/2	0	∓ 2	± 2
2 \rightarrow 2	∓ 3	0*	∓ 3

Таблица II. σ -компоненты H_α

$ n_{\psi 1} \rightarrow n_{\psi 2} $	$\pm 3(3 - 2 n_{\psi 1})$	$\pm 2(2 - 2 n_{\psi 2})$	Δ
1/2 \rightarrow 1	± 6	0	± 6
1 \rightarrow 1/2	± 3	± 2	$\pm 1, \pm 5$
1 \rightarrow 3/2	± 3	∓ 2	$\pm 5, \pm 1$
3/2 \rightarrow 1	0	0	0
3/2 \rightarrow 2	0	0*	0
2 \rightarrow 3/2	∓ 3	∓ 2	$\mp 1, \mp 5$
5/2 \rightarrow 2	∓ 6	0*	∓ 6

Как можно видеть, полученные данные полностью совпадают с известными результатами [1] (то же самое относится и к линии H_β). Любопытно, что начиная с линии H_γ появляется необходимость в расширении правил отбора (2.5), а именно, переходы $\Delta |n_\psi| = 0$ для π -компонент необходимо дополнить переходами $\Delta |n_\psi| = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm(|n_1 - n_2| - 1)/2$, а переходы $\Delta |n_\psi| = \pm 1/2$ для σ -компонент — переходами $\Delta |n_\psi| = \pm 3/2, \pm 5/2, \dots, \pm(|n_1 - n_2| - 1)/2 + 1/2$. Так, "недостающие" при $\Delta |n_\psi| = 0$ π -компоненты H_γ со значениями $\Delta = \pm 2$, как и π -компоненты H_δ со значениями $\Delta = 0, \pm 4, \pm 8$, появляются при $\Delta |n_\psi| = 1$, в то же время "недостающие" при $\Delta |n_\psi| = \pm 1/2$ σ -компоненты H_δ со значениями $\Delta = \pm 2$ — при $\Delta |n_\psi| = 3/2$ (при этом другие новые расщепления не появляются).

4. Итак, проведенное исследование и сравнительный анализ двух альтернативных подходов к решению данной конкретной задачи позволили установить принципиальной важности факт: использование в пространственных задачах квантования подвижных координатных осей, имеющих дополнительную степень свободы по углу прецессии (ψ) относительно выделенного направления, требует, вообще говоря, дополнительного полуцелого квантования экваториального квантового числа n_ψ и соответствующей модификации правил перехода (в общем случае $\Delta n_\psi = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ — для π -компонент и $\Delta n_\psi = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots$ — для σ -компонент спектральных линий). С другой стороны, хорошо известно, что в старой квантовой теории, как раз в подвижных координатных осях, прецессирующих относительно направления однородного магнитного поля, исследуется нормальный эффект Зеемана, при этом используются обычные (как и в неподвижных осях) правила квантования и отбора для экваториального квантового числа n_ψ , что явно противоречит установленному здесь факту. Обратившись вновь к данной классической задаче, авторы обнаружили одну существенную неточность, допущенную в цитируемых здесь [1–3] и других работах при составлении выражения для приращения полной энергии электрона, в котором почему-то опускается потенциальная энергия взаимодействия магнитного момента атома с возмущающим однородным магнитным полем (равная по величине приращению кинетической энергии ΔT , обусловленному прецессией орбитальной плоскости электрона, $\Delta T = = hn_\psi eH/4\pi m_0 c$, H — напряженность магнитного поля [1–3]). Если устранить данную неточность, то приращение полной энергии ΔW электрона в действительности должно быть вдвое большим, и тогда, применяя новые правила квантования и отбора для экваториального квантового числа в прецессирующих осях, получим классическую картину расщеплений спектральных линий ($\Delta \nu = 0$ для π -компонент, $\Delta \nu = IeH/4\pi m_0 c$ для σ -компонент). Это является лишним свидетельством справедливости сделанных выше утверждений (2*).

ПРИМЕЧАНИЯ

^(*) Исследование эволюции орбиты в работе [5] проводится на основе осредненных на интервале $(0, 2\pi)$ уравнений небесной механики, где в качестве независимой переменной используется угловая дальность ν , измеряемая в плоскости развертки пространственной траектории материальной точки и связанная с текущим временем t уравнением

$$d\nu/dt = k^{1/2} p^{-3/2} (1 + \varepsilon \cos \vartheta)^2,$$

где k — произведение гравитационной постоянной на массу центрального притягивающего тела (применительно к рассматриваемому здесь электрону $k = Ze^2/m_0$), $p = a(1 - \varepsilon^2)$ — фокальный параметр орбиты, ϑ — истинная аномалия. Введение такой переменной позволяет интерпретировать пространственное движение в центральном поле, как результат обкатывания орбитальной плоскости (с фиксированной линией отсчета угла ϑ) по конической поверхности, сметаемой радиусом-вектором материальной точки с началом в центре притяжения O .

⁽²⁾ Интересно отметить, что если к нормальному эффекту Зеемана применить аналогичное рассмотренному выше "расширенное" правило перехода ($\Delta|n_\psi| = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \max(n_1, n_2)$ — для π -компоненты $\Delta|n_\psi| = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots, \pm(\max(n_1, n_2) - 1/2)$ для σ -компонент), то теоретически возможна более широкая картина расщеплений спектральных линий: так, например, для линии H_α (в единицах постоянной $\Delta_H = \hbar eH/4\pi m_0 c$) будем

иметь $\Delta_H = \{0, \pm 2, \pm 4\}$ — для π -компонент, $\Delta_H = \{\pm 1, \pm 3, \pm 5\}$ — для σ -компонент; у каждой последующей линии количество расщеплений увеличивается (с тем же шагом ± 2) на единицу.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зоммерфельд А. Строение атома и спектры, Т. 1. М., Гостехиздат, 1956.
2. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. М., Физматгиз, 1962.
3. Фриш С.Э. Оптические спектры атомов. М., Л., Физматгиз, 1963.
4. Джеммер М. Эволюция понятий квантовой механики. М., Наука, 1985.
5. Копнин Ю.М. Инж. ж. 1965, 5: 6.