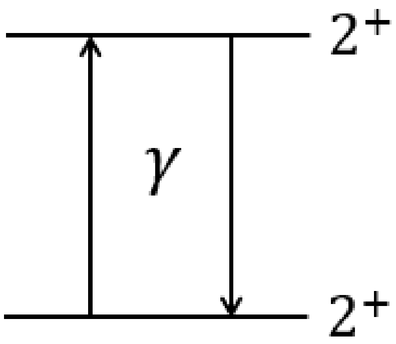
Длинноволновое приближение: длина волны фотона (λ) много больше размера системы (R)



$M1, E2, M3, E4$

В длинноволновом приближении, т. е. при $\lambda >> R$ можно предсказать каковы вероятности поглощения (испускания) фотонов различного типа и мультипольности.

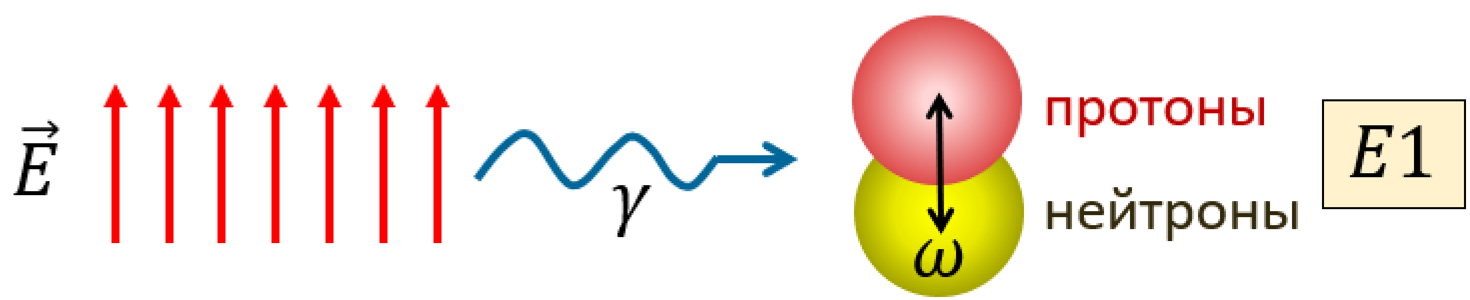
Пусть на ядро падает плоская монохроматическая электромагнитная волна. Её векторный потенциал (классический аналог волновой функции фотона) имеет вид:

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \vec{A}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)},$$

где $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$ —волновой вектор, а $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число. Такая волна при $\lambda \gg R$ $(kR \ll 1)$ внутри системы (при $r < R$) допускает разложение в ряд:

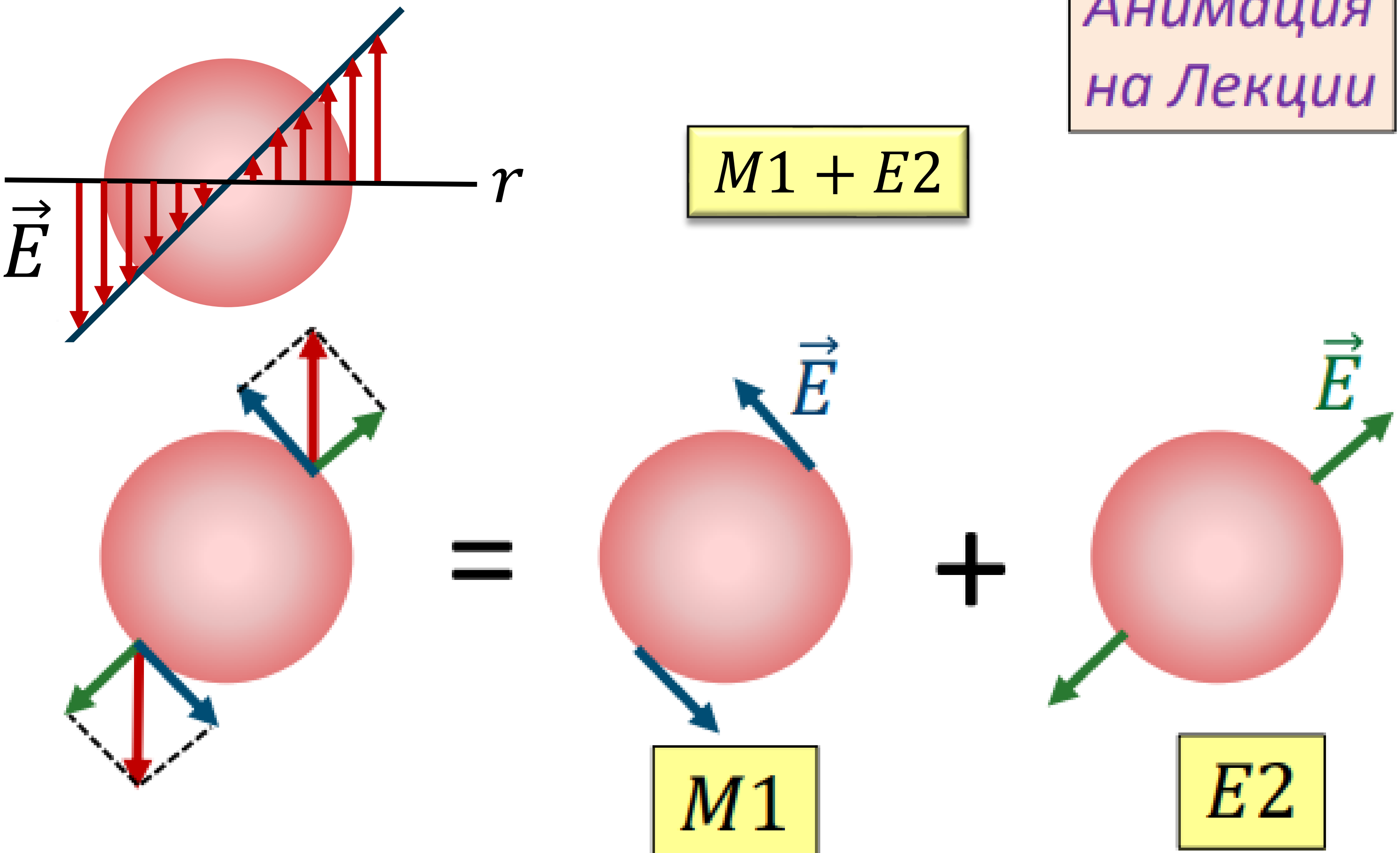
$$\vec{A}(\vec{r},t) = \vec{A}_0 e^{-i\omega t}\left[1 + i\vec{k}\vec{r} + \frac{1}{2}\left(i\vec{k}\vec{r}\right)^2 + \frac{1}{6}\left(i\vec{k}\vec{r}\right)^3 + \cdots\right]$$

Слагаемое $\vec{A}_0 e^{-i\omega t} \cdot 1$ отвечает однородному (одинаковому во всём пространстве полю, вызывающему электрические дипольные колебания:



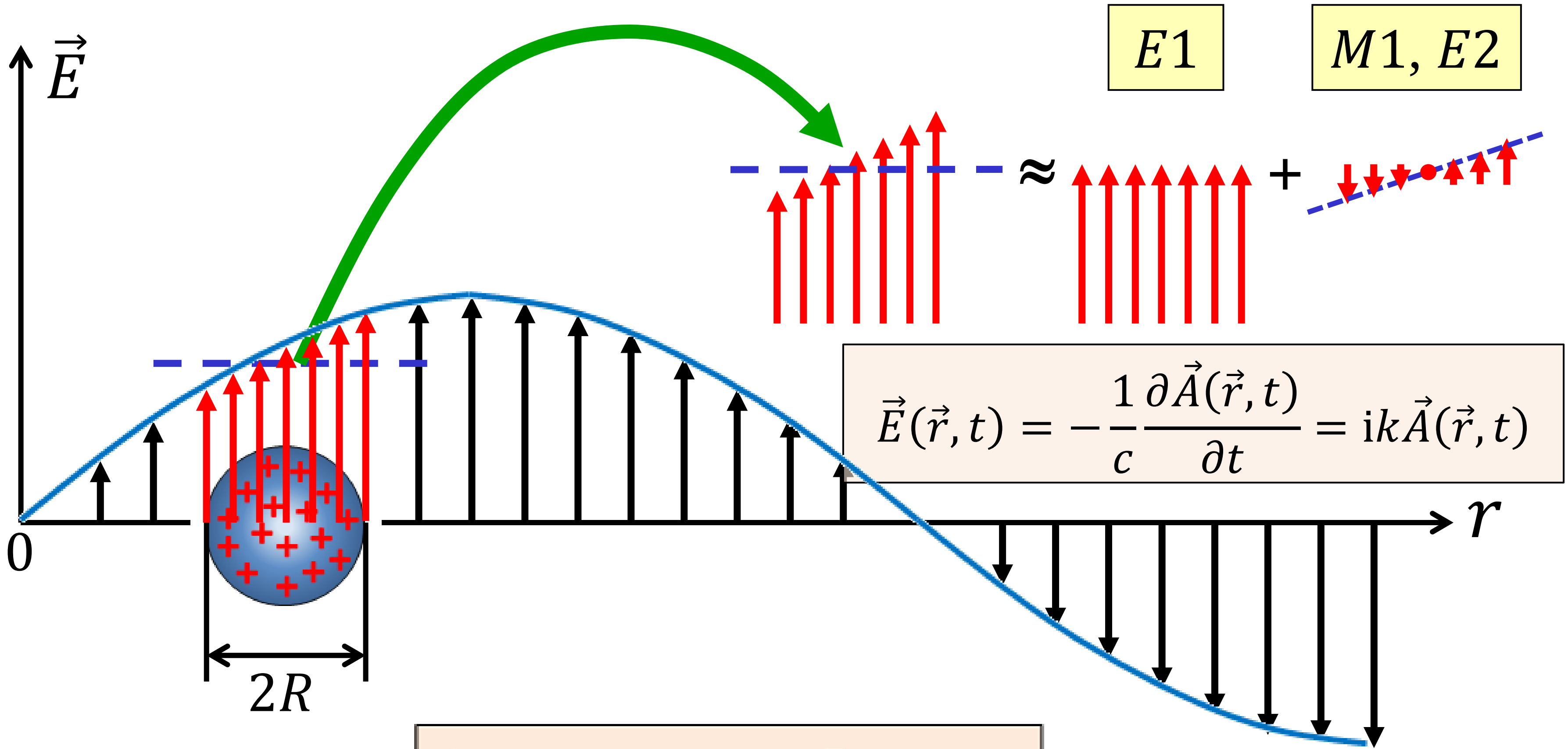
Слагаемое $\vec{A}_0 e^{-i\omega t} \cdot i\vec{k}\vec{r}$
отвечает полю линейному по r:

Анимация
на Лекции



Длинноволновое приближение: длина волны фотона >> размера системы

$$\lambda \gg R$$



$$\vec{E}(\vec{r},t) = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}(\vec{r},t)}{\partial t} = \mathrm{i}k\vec{A}(\vec{r},t)$$

Анимация на Лекции

Продолжая аналогичный анализ для более высоких членов разложения при $\lambda \gg R$ $(kR \ll 1)$ можно прийти к следующему соответствию слагаемых этого разложения фотонам различного типа:

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \vec{A}_0 e^{-i\omega t}\left[1 + i\vec{k}\vec{r} + \frac{1}{2}\left(i\vec{k}\vec{r}\right)^2 + \frac{1}{6}\left(i\vec{k}\vec{r}\right)^3 + \cdots\right]$$

$L = 0$	$L = 1$	$L = 2$	$L = 3$
$E1$	$M1, E2$	$M2, E3, E1$	$M3, E4, E2$

$$L = \begin{cases} J & \text{при } MJ \\ J \pm 1 & \text{при } EJ \end{cases}$$

При прочих равных условиях доминирует $E1$:

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \vec{A}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \approx \vec{A}_0 e^{-i\omega t}$$

Таким образом в длинноволновом приближении плоская монохроматическая волна является суперпозицией парциальных волн с различными орбитальными моментами L фотонов. Пространственная часть этих волн играет роль амплитуд этих парциальных волн в определённой точке пространства $\vec{r}$. Поэтому интенсивность конкретной парциальной волны в этой точке даётся квадратом модуля амплитуды соответствующей парциальной волны.

Вероятность w_L фотонам с определённым L быть поглощёнными ядром пропорциональна числу фотонов с данным L в объёме ядра, т.е. интенсивности парциальной волны, которая, в свою очередь, даётся квадратом модуля амплитуды этой волны: $w_L \sim |A_L|^2$.

Амплитуды парциальных волн:

электрических	*магнитных*
$A_{E1} \sim (kr)^0 = 1,$	$A_{M1} \sim (kr)^1,$
$A_{E2} \sim (kr)^1$	$A_{M2} \sim (kr)^2,$
$A_{E3} \sim (kr)^2,$	$A_{M3} \sim (kr)^3,$
$A_{E4} \sim (kr)^3,$ L	$A_{M4} \sim (kr)^4,$
....	 L
$A_{EJ} \sim (kr)^{J-1}.$	$A_{MJ} \sim (kr)^{J}$

Отсюда сразу получаем (R – радиус ядра):

$$w(EJ) \sim (kR)^{2(J-1)} \sim \left(\frac{R}{\bar{\lambda}}\right)^{2(J-1)},$$

$$w(MJ) \sim (kR)^{2J} \sim \left(\frac{R}{\bar{\lambda}}\right)^{2J}.$$

Для отношения вероятностей электромагнитных переходов различного типа и мультипольности при $\lambda \gg R$ имеем:

$$\boxed{\frac{w(MJ)}{w(EJ)} \approx (kR)^2 \ll 1}$$

$$\boxed{\frac{w(MJ+1)}{w(MJ)} \approx \frac{w(EJ+1)}{w(EJ)} \approx (kR)^2 \ll 1}$$

Преимущественное взаимодействие атомов и ядер с $E1$-фотонами при $\lambda \gg R$ объясняется тем, что у такой электромагнитной волны внутри таких малых объектов как атомы и ядра оказываются практически только $E1$-фотоны, в меньшей степени – $M1, E2$, в ещё меньшей степени – $M2, E3$ и так далее.

Таким образом, если правилами отбора разрешено поглощение (испускание) фотонов любого типа и мультипольности, то при $\lambda \gg R$ вероятности их поглощения (испускания) будут падать в следующей последовательности:

$$\boxed{E1} \rightarrow \boxed{M1, E2} \rightarrow \boxed{M2, E3} \rightarrow \boxed{M3, E4} \rightarrow \boxed{M4, E5} \rightarrow \dots$$

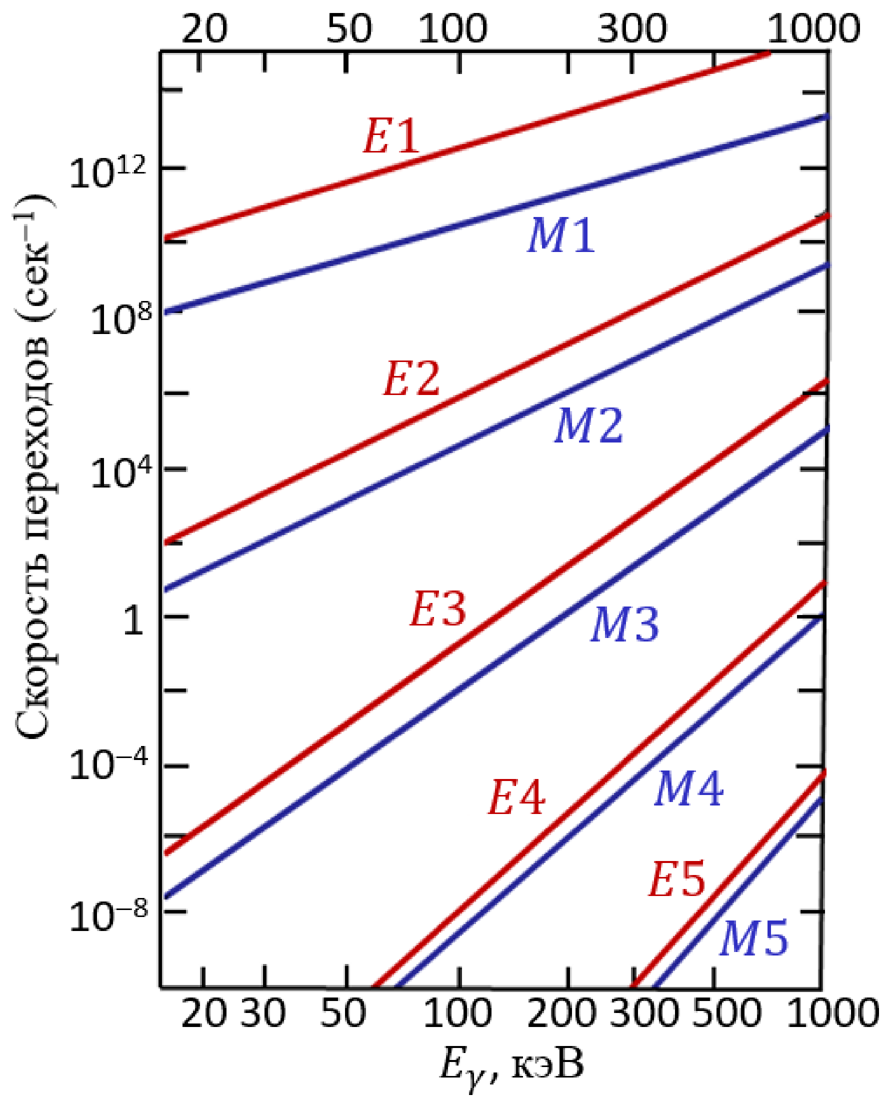
Применимо ли длинноволновое приближение ($\lambda \gg R$) к атомному ядру? Для атомного ядра ситуация $\lambda \gg R$ и $(kR)^2 \ll 1$ является типичной. Рассмотрим пример: Ядро с $A = 200$ и фотон с $E_\gamma = 10$ МэВ.

Радиус ядра ^{208}Pb: $R = 1{,}1 \cdot A^{1/3}$ Фм $\approx 6{,}5$ Фм.

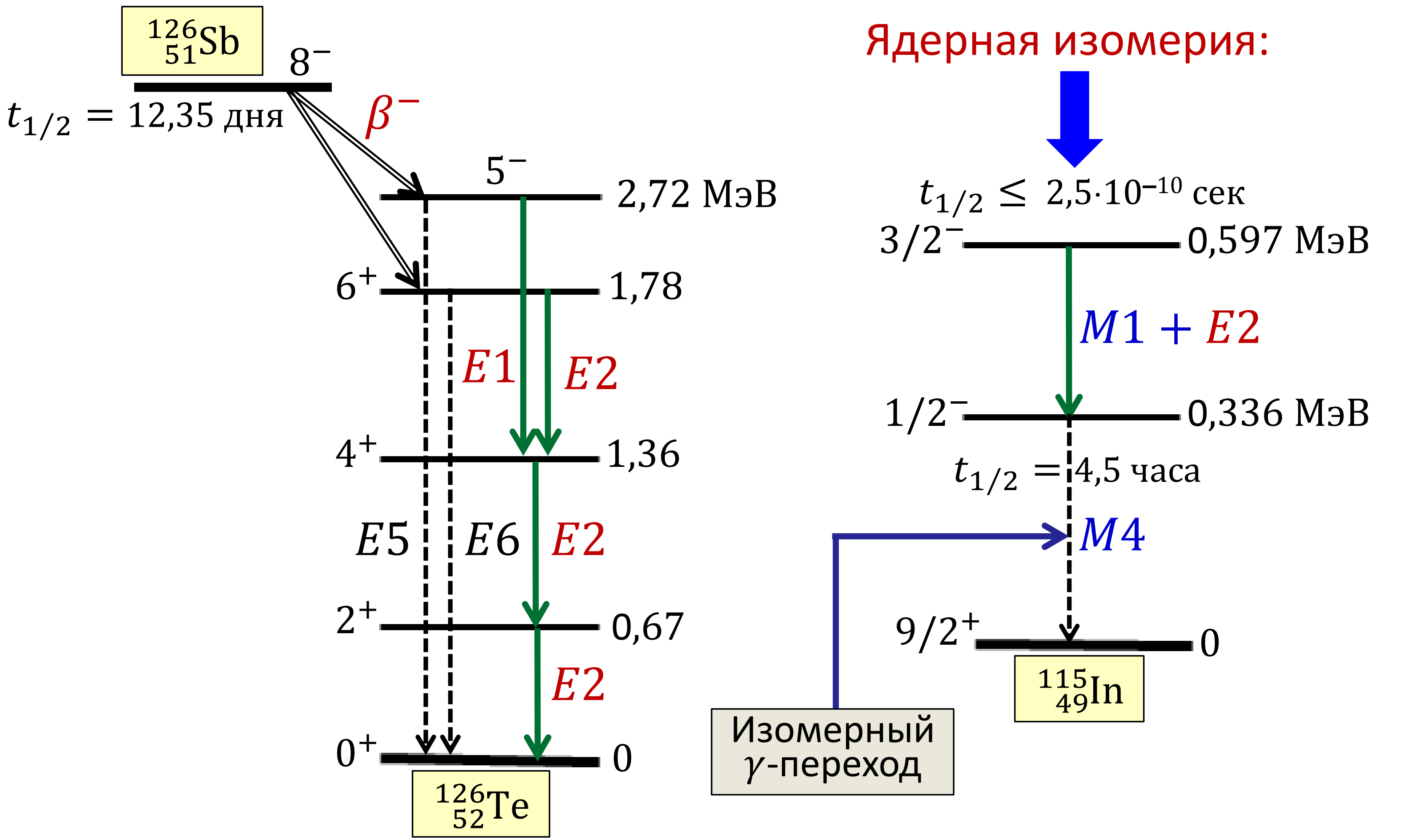
$$\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{E_\gamma} = \frac{6{,}28 \cdot 200\ \text{МэВ} \cdot \text{Фм}}{10\ \text{МэВ}} \approx 126\ \text{Фм},$$

$$(kR)^2 = \left(\frac{2\pi}{\lambda} R\right)^2 \approx 0{,}1.$$

Скорости гамма-переходов в ядре из 100 нуклонов, рассчитанные S.A.Moszkowski (1965 г.)



В ядрах распространены каскады γ-переходов.
Обычно для них $t_{1/2} < 10^{-7}$ сек



Итак, в длинноволновом приближении ($\lambda \gg R$) при прочих равных условиях (т.е. когда нет запретов, обусловленных правилами отбора по моменту и четности) должно доминировать взаимодействие системы с электрическим дипольным ($E1$) излучением.

Это во многих случаях применимо к атому и атомному ядру.

Оператор взаимодействия $E1$-излучения с системой без спина имеет вид

$\hat{V}_{E1}(\vec{r},t) = -\frac{1}{c}\sum_{\alpha=1}^{A}\frac{e_\alpha}{m_\alpha}\vec{A}_{E1}(\vec{r}_\alpha,t)\cdot\hat{\vec{p}}_\alpha$, где $\hat{\vec{p}}$ – оператор импульса.

Причем, как следует из разложения плоской волны при $\lambda \gg R$ ($kR \ll 1$)

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \vec{A}_0 e^{-i\omega t}\left[1 + i\vec{k}\vec{r} + \frac{1}{2}\left(i\vec{k}\vec{r}\right)^2 + \frac{1}{6}\left(i\vec{k}\vec{r}\right)^3 + \cdots\right],$$

первый член $\vec{A}_0 e^{-i\omega t}$ этого разложения, отвечающий единице в скобках, относится целиком к $E1$-компоненте электромагнитной волны. Поэтому

$$\hat{V}_{E1}(\vec{r},t) = -\frac{1}{c}\vec{A}_0 e^{-i\omega t}\sum_{\alpha=1}^{A}\frac{e_\alpha}{m_\alpha}\hat{\vec{p}}_\alpha$$

и входящий в матричный элемент электромагнитного перехода $\langle f|\hat{v}(\vec{r})|i\rangle$ оператор $\hat{v}_{E1}(\vec{r}) = \hat{V}_{E1}(\vec{r},t=0)$ дается соотношением

$$\hat{v}_{E1}(\vec{r}) = -\frac{\vec{A}_0}{c}\sum_{\alpha=1}^{A}\frac{e_\alpha}{m_\alpha}\cdot\hat{\vec{p}}_\alpha.$$

Матричные элементы электромагнитных переходов в длинноволновом приближении

Матричный элемент для $E1$-переходов:

$$\langle f|\hat{v}_{E1}(\vec{r})|i\rangle = -\frac{\vec{A}_0}{c}\sum_{\alpha=1}^{A}\frac{e_\alpha}{m_\alpha}\langle f|\hat{\vec{p}}_\alpha|i\rangle.$$

Из квантовой механики:

$$\langle f|\hat{\vec{p}}_\alpha|i\rangle = \frac{E_i - E_f}{i\hbar} m_\alpha \langle f|\vec{r}_\alpha|i\rangle = i m_\alpha \omega_{fi}\langle f|\vec{r}_\alpha|i\rangle,$$ где $\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$

и

$$\langle f|\hat{v}_{E1}(\vec{r})|i\rangle = \vec{A}_0 \sum_{\alpha=1}^{A} e_\alpha \frac{E_f - E_i}{ic\hbar}\langle f|\vec{r}_\alpha|i\rangle = \vec{A}_0 \frac{E_f - E_i}{ic\hbar}\langle f|\sum_\alpha e_\alpha \vec{r}_\alpha|i\rangle =$$

$$= \vec{A}_0 \frac{E_f - E_i}{ic\hbar}\langle f|\vec{\mathcal{D}}|i\rangle,$$

где

$\vec{\mathcal{D}} = \sum_\alpha^A e_\alpha \vec{r}_\alpha$ − электрический дипольный момент системы

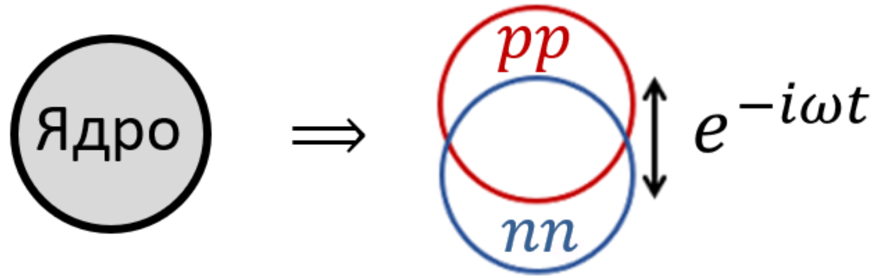
В длинноволновом приближении имеется следующая логическая цепь:

$$E1 \Longrightarrow \langle f|\hat{v}_{E1}(\vec{r})|i\rangle \Longrightarrow \langle f|\mathcal{D}_1|i\rangle$$

$\mathcal{D}_1$ – электрический дипольный момент системы

Колебание электрического дипольного момента системы:

$E1 \Longrightarrow$

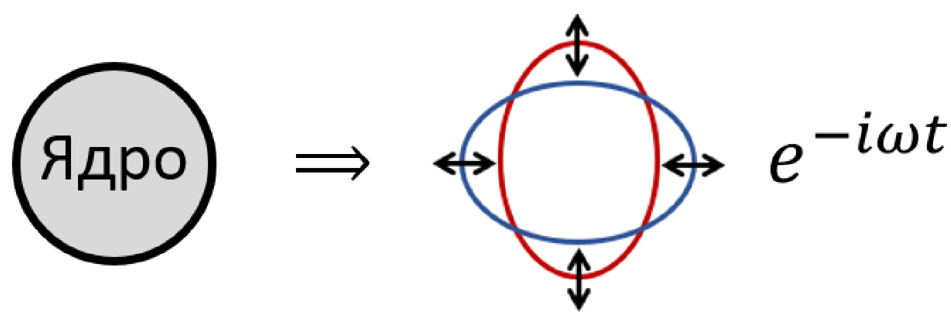


$$E2 \Longrightarrow \langle f|\hat{v}_{E2}(\vec{r})|i\rangle \Longrightarrow \langle f|\mathcal{D}_2|i\rangle$$

$\mathcal{D}_2$ – электрический квадрупольный момент системы

Колебание электрического квадрупольного момента системы:

$E2 \Longrightarrow$



$$EJ \Longrightarrow \left\langle f\left|\hat{v}_{EJ}(\vec{r})\right|i\right\rangle \Longrightarrow \left\langle f\left|\mathcal{D}_J\right|i\right\rangle$$

$\mathcal{D}_J$ – электрический момент системы размерности (мультипольности) J

Колебание электрического момента системы мультипольности J

В квантовых расчетах необходимо учитывать проекцию M момента J на выделенное направление. Поэтому в матричных элементах фигурируют JM-компоненты статических электрических моментов системы – $\mathcal{D}_{JM}$:

$$\boxed{\mathcal{D}_{JM} = \sqrt{\frac{4\pi}{2J+1}} \sum_{\alpha} e_\alpha r_\alpha^J Y_{JM}(\theta_\alpha, \varphi_\alpha)}$$

$\mathcal{D}_{00} = \sum_\alpha e_\alpha = Q$ – электрический заряд системы.

$$\vec{\mathcal{D}} \Longrightarrow \begin{cases} \mathcal{D}_{10} = \sum_\alpha e_\alpha r_\alpha Cos\theta = \mathcal{D}_z, \\ \mathcal{D}_{1\pm1} = \mp \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathcal{D}_x \pm \mathcal{D}_y\right). \end{cases}$$

$\mathcal{D}_{2M}$ – компоненты тензора электрического квадрупольного момента $(M = 0, \pm1, \pm2)$

Аналогичная ситуация имеет место и для переходов, вызванных фотонами магнитного типа MJ. В длинноволновом приближении соответствующие матричные элементы $\langle f|\hat{v}_{MJ}(\vec{r})|i\rangle$ сводятся к матричным элементам $\langle f|\mathcal{M}_J|i\rangle$, где $\mathcal{M}_J$ – магнитные моменты системы мультипольности J.

Правило сумм Томаса-Райха-Куна (ТРК) для электрических дипольных переходов в атомах

Эффективное сечение σ поглощения фотонов квантовой системой определяется выражением

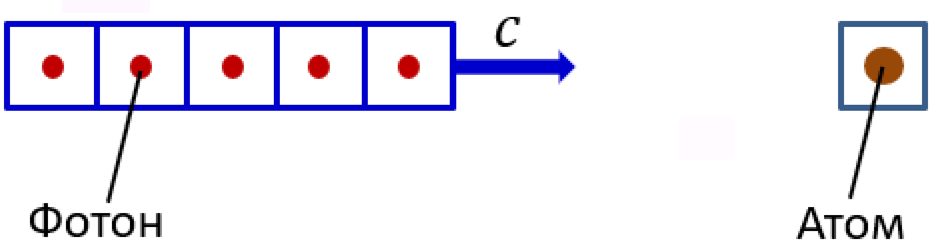
$$\sigma = \frac{w}{\text{плотность потока фотонов}},$$

где w – вероятность перехода системы в единицу времени под действием возмущения в первом порядке нестационарной теории возмущения дается выражением

$$w = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle f|\hat{v}(\vec{r})|i\rangle\right|^2 \rho_f\left(E_f\right).$$

Пусть поток фотонов отвечает одному фотону в единице объёма, тогда этот поток численно равен скорости света c и

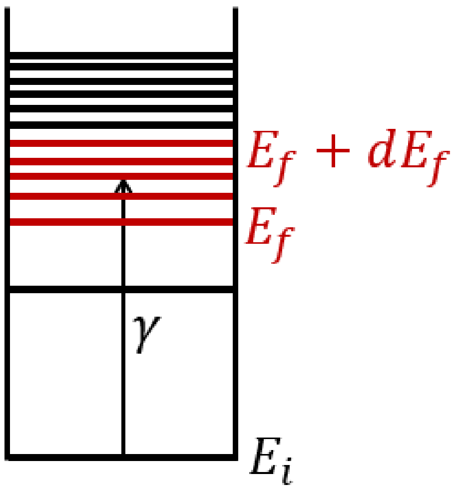
$$\sigma = \frac{w}{c} = \frac{2\pi}{\hbar c}\left|\langle f|\hat{v}(\vec{r})|i\rangle\right|^2 \rho_f\left(E_f\right).$$



Если конечные состояния квантовой системы принадлежат дискретному спектру, то вместо выражения для σ, содержащего плотность конечных состояний $\rho_f(E_f)$, можно записать эквивалентное ему выражение

$$\sigma = \frac{2\pi}{\hbar c} \cdot \frac{1}{dE_f} \sum_f |\langle f|\hat{v}(\vec{r})|i\rangle|^2,$$

где сумма берется по конечным состояниям, лежащим внутри интервала энергий от E_f до $E_f + dE_f$.



Тогда сечение фотопоглощения, проинтегрированное по всей области энергий возбуждения системы, приобретает вид

$$\int_0^\infty \sigma dE = \frac{2\pi}{\hbar c} \sum_i^{\text{все}} |\langle f|\hat{v}(\vec{r})|i\rangle|^2 .$$

Проделаем вычисления для $E1$-фотонов, используя соответствующее выражение для матричного элемента:

$$\langle f|\hat{v}_{E1}(\vec{r})|i\rangle = \vec{A}_0 \frac{E_f - E_i}{ic\hbar}\langle f|\vec{\mathcal{D}}|i\rangle,$$

где $\vec{\mathcal{D}} = \sum_\alpha^A e_\alpha \vec{r}_\alpha$ – электрический дипольный момент системы

Если n фотонов в единице объема, то $A_0 = \sqrt{\frac{2\pi\hbar n}{\omega}} \cdot c$

и при одном фотоне в единице объема $A_0 = \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega}} \cdot c$.

Учитывая, что $\vec{A}_0 = A_0\vec{\varepsilon}$, где $\vec{\varepsilon}$ –единичный вектор поляризации волны, и, полагая $\vec{\varepsilon} \parallel \vec{z}$, получаем $\vec{\varepsilon} \cdot \vec{\mathcal{D}} = \vec{\varepsilon} \sum_\alpha^A e_\alpha \vec{r}_\alpha = \sum_\alpha^A e_\alpha z_\alpha = \mathcal{D}_z$ и

$$\boxed{\int_0^\infty \sigma_{E1} dE = \frac{4\pi^2}{c} \sum_f^{\text{все}} \omega_{fi} |\langle f|\mathcal{D}_z|i\rangle|^2,}$$ где $\omega \equiv \omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$

Далее рассмотрим поглощение $E1$-фотонов одноэлектронным атомом.

Для того что исключить эффект рассеяния электромагнитной волны атомом как неизменным целым объектом, оставив для рассмотрения лишь поглощение волны атомом с изменением его внутреннего состояния (т. е. с изменением относительного состояния электрона и ядра атома), используем систему центра инерции. При этом в качестве массы атома необходимо взять его приведенную массу, которая с большой точностью совпадает с массой электрона m, поскольку она много меньше массы ядра. В качестве электрического дипольного момента атома можно использовать выражение $\vec{\mathcal{D}}_{\text{ат}} = e\vec{r}$, где e — заряд электрона, а $\vec{r}(x, y, z)$ — радиус-вектор электрона относительно ядра, поскольку центр инерции атома практически совпадает с положением ядра.

Итак, для одноэлектронного атома можно записать

$$\int_0^\infty \sigma_{E1}^{\text{ат}} dE = \frac{4\pi^2 e^2}{c} \sum_i^{\text{все}} \omega_{fi} |\langle f|z|i\rangle|^2.$$

Введем понятие *силы осциллятора перехода* F_{fi} электрона из состояния i в состояние f

$$F_{fi} = \frac{2m}{\hbar} \omega_{fi} |\langle f|z|i\rangle|^2.$$

Тогда

$$\boxed{\int_0^\infty \sigma_{E1}^{\text{ат}} dE = \frac{2\pi^2 e^2 \hbar}{mc} \sum_i^{\text{все}} F_{fi}}$$

Докажем теорему Томаса-Райха-Куна (Thomas-Reiche-Kuhn)

Представим F_{fi} в виде:

$$F_{fi} = \frac{2m}{\hbar}\omega_{fi}|\langle f|z|i\rangle|^2 = \frac{m}{\hbar}\,\omega_{fi}[\langle f|z|i\rangle^*\langle f|z|i\rangle + \langle f|z|i\rangle^*\langle f|z|i\rangle].$$

Далее, используя известные квантовомеханические соотношения

$im\omega_{fi}\langle f|z|i\rangle = \langle f|\hat{p}_z|i\rangle$ и $\langle f|z|i\rangle^* = \langle i|z|f\rangle$, получаем

$$F_{fi} = \frac{1}{i\hbar}[\langle i|z|f\rangle\langle f|\hat{p}_z|i\rangle - \langle i|\hat{p}_z|f\rangle\langle f|z|i\rangle].$$

Тогда $\sum_f F_{fi} = \frac{1}{i\hbar}\,[\langle i|z\hat{p}_z|i\rangle - \langle i|\hat{p}_z z|i\rangle] = \frac{1}{i\hbar}\underbrace{\langle i|z\hat{p}_z - \hat{p}_z z|i\rangle}_{i\hbar} = 1$

Это и есть теорема Томаса-Райха-Куна (ТРК)

С учетом её для атома водорода ($\mathcal{Z} = 1$) получаем

$$\boxed{\int_0^\infty \sigma_{E1}^{\text{ат}} dE = \frac{2\pi^2 e^2 \hbar}{mc}}$$

Для произвольного атома, содержащего $\mathcal{Z}$ электронов имеем

$$\boxed{\int_0^\infty \sigma_{E1}^{\text{ат}} dE = \frac{2\pi^2 e^2 \hbar}{mc}\mathcal{Z}}$$

поскольку каждый электрон вносит независимый вклад в сечение.