ФИЗИКА

УДК 530.145; 539.184 DOI: https://doi.org/10.34680/2076-8052.2022.3(128).114-119

АТОМ ВОДОРОДА

Я.И.Грановский

HYDROGEN ATOM

Ya.I.Granovsky

Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, yagran1931@gmail.com

Периодическая система элементов начинается с атома водорода; свойства которого определяют её общие черты. Сегодня необходимо переосмыслить историю создания его теории, упростить и осовременить используемые методы. В предлагаемой статье рассматривается ряд знакомых проблем, решённых незнакомыми методами, простыми и короткими. Все они основаны на глубоком проникновении в суть задачи.

Ключевые слова: водород, уравнение Шредингера, уравнение Дирака

Для цитирования: Грановский Я.И. Атом водорода // Вестник НовГУ. Сер.: Технические науки. 2022. №3(128). С.114-119. DOI: https://doi.org/10.34680/2076-8052.2022.3(128).114-119

The Periodic Table of the Elements begins with the hydrogen atom whose properties determine its general features. Today, it is necessary to rethink the history of the creation of the theory, to simplify and modernize the methods used. This article discusses a number of common problems solved by uncommon methods, simple and short. All of them are based on a deep insight into the essence of the problem.

Keywords: hydrogen, Schrödinger equation, Dirac equation

For citation: Granovsky Ya.I. Hydrogen atom // Vestnik NovSU. Issue: Engineering Sciences. 2022. №3(128). P.114-119. DOI: https://doi.org/10.34680/2076-8052.2022.3(128).114-119

Введение

В первой декаде XX в. самой важной проблемой стало решение задачи о структуре атома и, в частности, простейшего из них — атома водорода. Этот атом более полувека служил «пробным камнем» всей атомной теории.

Планетарная модель атома возродила к новой жизни полузабытую задачу Кеплера — Ньютона о движении в поле тяготения, заменив гравитацию кулоновской силой [1]. Уже через два года Н.Бор показал [2], что в микромире действует другая механика, основанная на квантовых идеях М.Планка и А.Эйнштейна.

В течение последующих двадцати лет развитие теории атома водорода находилось в центре внимания физиков. На примере этого объекта оттачивались идеи В.Гейзенберга [3], П.Дирака [4] и Э.Шредингера [5]. К концу 1926 г. стала ясной необходимость релятивизации квантовой механики, которая была успешно решена Дираком [6] и породила новое течение — теорию античастиц.

Но и после 1932 г. теория Н-атома продолжала развиваться: изучалась его симметрия, уточнялась дираковская теория [7], были открыты конформные свойства и т.д.

Эти достижения необходимо сделать достоянием широких масс студенчества, равно как и физиков, работающих в других направлениях. Этой задаче посвящён предлагаемый обзор.

I. Уравнение Шредингера

Летом 1925 г. В.Гейзенберг предложил свой вариант теории атома, названный впоследствии матричной механикой; каждая динамическая величина записывалась в виде матрицы, были указаны правила действия с ними, которые позволили В.Паули уже осенью того же года построить количественную теорию атома водорода. Эти расчёты были опубликованы в январе 1926 г. на десять дней раньше анонса статьи Э.Шредингера, ставшей основным методом новой механики микромира.

1а. Стандартный метод

Исходным пунктом является волновое уравнение Шредингера $\mathcal{H}\Psi = E\Psi$, из которого находят волновую функцию $\Psi(\vec{r})$ и энергию E. Уравнение решают, как правило, путём отделения углов от радиуса: $\Psi(\vec{r}) = \sum_{lm} C_{lm} f_{lm}(r) Y_{lm}(\theta,\varphi)$, после чего задача сводится к решению радиального уравнения

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2mZe^2}{\hbar^2 r} + \frac{2mE}{\hbar^2}\right] r f(r) = 0 \qquad (1)$$

Z — заряд ядра*, e — элементарный заряд, r — расстояние между ядром и электроном).

После перехода к безразмерной переменной $\rho=-2ikr$ (где $k=\sqrt{-2mE/\hbar^2}$) оно принимает вид, известный в математике как уравнение Э.Уиттекера

$$\left[(\partial_\rho)^2-\frac{1}{4}+i\frac{\xi}{\rho}-\frac{l(l+0)}{\rho^2}\right]\rho f(\rho)=0, \qquad (2)$$

$\xi=\frac{mZe^2}{\hbar^2 k}=\frac{Ze^2}{\hbar v}$ обозначает кулоновский параметр. Его регулярное решение $\mathcal{M}_{\xi\lambda}(\rho)$ сводится к вырожденной гипергеометрической функции $\Phi(a;c|\rho)$

$$\mathcal{M}_{\xi\lambda}(\rho)=e^{-\rho/2}\rho^{c/2}\Phi(a;c|\rho),\ a=l+1-i\xi,\ c=2l+2. \ (3)$$

Возвращаясь к прежним переменным, получим ответ

$$f(r)=Nr^l e^{ikr}\Phi(a;c|-2ikr), \qquad (4)$$

вывод которого обычно требует долгих вычислений. Формула (4) состоит из двух множителей, отражающих поведение искомой функции в особых точках 0 и ∞, и интерполирующей функции $\Phi(-2ikr)$. Это разбиение составляет суть стандартного метода.

Функция Куммера $\Phi(a;c|\rho)$ подчиняется уравнению $\rho\Phi''+(c-\rho)\Phi'-a\Phi=0$, из которого следует выражение в форме ряда $\sum_n \frac{\rho^n}{n!}\frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(c+n)}$ и интегральное представление $\int_0^1 t^{\rho t}t^{a-1}(1-t)^{c-a-1}dt$ (нормирующие множители опущены).

При вычислении радиальных интегралов функция $\Phi(\rho)$ должна возрастать не быстрее полинома. Это имеет место при условии $a=-n_r$. Таким образом, связанное состояние атома водорода возможно при $i\xi=n_r+l+1$. Следовательно, $E=\frac{m}{2}\left(\frac{Ze^2}{\hbar in}\right)^2=-\frac{Ry}{n^2}$. Получилась известная формула Н.Бора [2] для энергии n-го уровня. Постоянная Ридберга $\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}=\frac{1}{2}mc^2(Z\alpha)^2$, равная 13,606 eV — это ионизационный потенциал атома водорода, полученный Бором в той же статье.

1б. Импульсное представление. Симметрия В.А.Фока

В импульсном представлении аргументом волновой функции $\Psi(q)$ является импульс q. С гамильтонианом $\mathcal{H}=\frac{q^2}{2m}-\frac{Ze^2}{r}$ волновое уравнение принимает вид $\left(\frac{q^2}{2m}-\frac{Ze^2}{r}\right)\Psi=E\Psi.$

В этом представлении r является дифференциальным оператором $\hat{r}=-i\frac{\hbar}{q}\frac{\partial}{\partial q}q$, что позволяет записать уравнение в форме

$$-i\frac{\hbar}{q}\frac{\partial}{\partial q}q(q^2+k^2)\Psi=2mZe^2\Psi \qquad (5)$$

и проинтегрировать его: $\ln q(q^2+k^2)\Psi=$ $=i\frac{2mZe^2}{\hbar k}\mathrm{arctg}\frac{q}{k}+C.$ Итак,

$$\Psi(q)=C\frac{\exp[i\xi\omega]}{q(q^2+k^2)}. \qquad (6)$$

Здесь по-прежнему $\xi=\frac{Ze^2}{\hbar v}$ — кулоновский параметр, а $\omega=2\mathrm{arctg}\left(\frac{q}{k}\right)$. Выражение (6) может быть преобразовано к виду $C'\left(\cos\frac{\omega}{2}\right)^4\frac{\exp[i\xi\omega]}{\sin\omega}$.

Регулярное при $\omega=0$ решение таково**

$$\Psi(\omega)=C'\left(\cos\frac{\omega}{2}\right)^4\frac{\sin[\xi\omega]}{\sin\omega}. \qquad (7)$$

Эта формула имеет богатую историю: впервые она была получена в 1929 г. Б.Подольским и Л.Полингом [8] как преобразование Фурье координатной волновой функции (4); тремя годами позже Э.Хиллераас вывел её [9], решая уравнение Шредингера в импульсном представлении, а в 1935 г. В.А.Фок придал ей 4-мерное истолкование [10].

В работе Фока угловая переменная ω приобрела глубокий смысл: четыре координаты $(\vec{\zeta},\zeta_0)$ выражаются через неё как $(\vec{n}\sin\omega,\cos\omega)$, т. е. ω это широта точки на 4-мерной сфере. 4-мерная симметрия — это инвариантность относительно всех вращений.

В классической (неквантовой) теории эту симметрию генерируют два интеграла движения: орбитальный момент $\vec{L}$ и вектор Лапласа $\vec{K}=\vec{p}\times\vec{L}-\alpha m\vec{n}.$ Постоянство последнего ведёт к уравнению орбиты $r(\varphi)=\rho(1+\varepsilon\cos\varphi)^{-1}$ (умножив скалярно на $\vec{r}$, получим $Kr\cos\varphi=L^2-\alpha mr$, откуда следуют $r(\varphi)$, $\varepsilon=K/\alpha m$, $\rho=L^2/\alpha m$).

Аналогичное уравнение для импульса $p(\varphi)$ (годограф) нашёл У.Гамильтон в 1847 г. [11]. Мы получим его, умножив $\vec{K}$ векторно на $\vec{L}$: $\vec{L}\times\vec{K}=\vec{p}L^2-\alpha m\vec{L}\times\vec{n}$, т. е.

$$\vec{p}-Q\vec{e}=\vec{h},\ \vec{h}=\frac{\vec{L}\times\vec{K}}{L^2},\ Q=\frac{\alpha m}{L},\ \vec{e}=\frac{\vec{L}\times\vec{n}}{L}. \qquad (8)$$

Вектор Гамильтона $\vec{h}$, вместе с $\vec{L}$ и $\vec{K}$, является интегралом движения, он направлен вдоль малой оси эллипса и равен $h=\frac{K}{L}=Q\varepsilon$, , так что $\varepsilon=h/Q$. Отметим, что $Q\vec{e}=\vec{A}$ — это векторный потенциал кулоновского поля (в калибровке $\varphi=0$). Поэтому $\vec{h}$ является калибровочно-инвариантным импульсом (это первое появление калибровочной величины в теоретической физике).

Центр годографа сдвинут относительно атомного ядра на h (эксцентрик Птолемея). Его окружность является большим кругом 4-мерной сферы Фо-

* То есть фактически рассматривается *водородоподобный* атом.

** Однозначность решения требует $\xi=n=1,2,3$ ... как и в координатном представлении.

ка, с наклоном относительно полюса сферы на угол ω. Точка на сфере с этой координатой — это стереопроекция импульса на сферу из её северного полюса.

Годограф остаётся окружностью при изменении параметра h, но геометрия движения зависит от его величины: при $h = 0$ мы имеем круговое движение с постоянным импульсом; при $h < Q$ движение происходит по эллипсу; случаю $h = Q$ отвечает параболическая траектория. Очень интересен случай $h > Q$, когда силовой центр находится вне годографа: вектор импульса описывает одну из двух дуг окружности (меньшая — в случае отталкивания). Это соответствует рассеянию в кулоновском поле на угол $\theta = 2\arcsin\left(\frac{Q}{h}\right)$. Такова геометрия импульсного пространства.

Остаётся лишь добавить, что дробь $\frac{\sin(\omega n)}{\sin\omega}$ — это полином П.Чебышева $U_{n-1}(\cos\omega)$, частный случай ($l = 0$) полиномов Гегенбауэра $C_{n-l-1}^{l+1}(\cos\omega)$, описывающих возбуждённые состояния, в которых $l \neq 0$.

1в. Симметрия. Алгебра Ю.Б.Румера.

Описанная в предыдущем разделе 4-мерная симметрия Фока является симметрией отдельного состояния с заданной энергией. Её генераторы, орбитальный момент и вектор Лапласа, коммутируют с гамильтонианом и вследствие этого *не могут* перевести атом из одного состояния в другое (этому типу симметрии присвоена приставка *пара*-).

Чтобы воспроизвести весь спектр состояний, необходима симметрия другого типа (метасимметрия), в состав которой входят гамильтониан и *не*коммутирующие с ним генераторы, чьи матричные элементы связывают разные состояния.

В 1970 г. проф. Ю.Б.Румер вместо того, чтобы решать диф-уравнение Уиттекера, записал его [12] в виде $R_1\Psi = \xi\Psi$, где $R_1 = r(\vec{p}^2 + k^2)/2k$. Вместе с $R_2 = r(\vec{p}^2 - k^2)/2k$ и $R_3 = -i(\vec{r}\nabla + 1)$ эти операторы образуют алгебру O(1,2)

$$[R_1, R_2] = iR_3,\ [R_2, R_3] = -iR_1,\ [R_3, R_1] = iR_2, \tag{9}$$

которая отличается от известной изотропной алгебры O(3) знаком второго коммутатора. Как и в O(3), в ней существует оператор $R_+ = R_2 + iR_3$, коммутирующий с R_1 по правилу $[R_1, R_+] = R_+$. Это означает, что наряду с Ψ, имеющей собственное значение ξ, существует функция $\Psi' = R_+\Psi$ с собственным значением $\xi' = \xi + 1$. Процесс можно продолжать неограниченно, поскольку алгебра O(1,2) некомпактна.

Наряду с R_+ существует оператор понижения $R_- = R_2 - iR_3$, действующий в противоположном направлении — исходя из одной функции можно построить их все! Зная, что $\xi = \xi_0 + n$, можно найти соответствующую энергию $E = \frac{mv^2}{2} = -\frac{m}{2}\left(\frac{Ze^2/\hbar}{\xi_0 + n}\right)^2 = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2N^2}$.

Алгебра Румера заменяет дифференциальное уравнение Шредингера.

1г. Точное решение. Рассеяние

Разложение на парциальные волны вряд ли можно называть удобным; однако в случае кулоновского взаимодействия удаётся свернуть этот бесконечный ряд и получить замкнутое выражение.

Достаточно выделить из волновой функции множитель $f = \exp(ikz)$ и использовать формулу

$$\nabla^2(fF) = \left[f\nabla^2 + 2\nabla f\nabla + \nabla^2 f\right]F = $$
$$= \exp(ikz)\left[\nabla^2 F + 2ik\vec{e}\nabla F - k^2 F\right], \tag{10}$$

чтобы привести волновое уравнение $(\nabla^2 + 2mZ\alpha/r + k^2)\Psi = 0$ к виду $\nabla^2 F + 2ik\vec{e}\nabla F + {}$ $+ 2mZ\alpha/rF = 0$.

Если в качестве аргумента взять параболическую координату $u = (r - z)$ (параболические координаты в 1916 г. применил П.Эпштейн, рассматривая эффект Штарка в водороде), то уравнение примет вид вырожденного гипергеометрического

$$uF''(u) + (1 - u)F'(u) - i\xi F(u) = 0 \tag{11}$$

с функцией Куммера $\Phi[i\xi;1|ik(r - z)]$ в качестве решения.

Волновая функция имеет вид модулированной плоской волны $\Psi(\vec{r}) = Ce^{ikz}\Phi(iku)$, но её можно преобразовать по Куммеру в $Ce^{ikz}\Phi(1 - i\xi;1| - ik(r - z))$, т. е. в расходящуюся сферическую волну, описывающую рассеянную частицу. Отношение квадратов модулей амплитуд сферической и плоской волны в асимптотике равно дифференциальному сечению рассеяния

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left|\frac{r\Phi(1 - i\xi;1| - ik(r - z))}{\Phi(i\xi;1|ik(r - z))}\right|^2 = \left(\frac{\xi/k}{1 - \cos\vartheta}\right)^2; \tag{12}$$

Здесь по-прежнему кулоновский параметр $\xi = Z\alpha m/k$, k — асимптотический импульс, ϑ — угол рассеяния.

Совпадение этой *квантовой* формулы с *классическим* результатом Э.Резерфорда сыграло важную роль в истории физики.

II. Уравнение Дирака

2а. Основные сведения

2 января 1928 г. английский журнал «Proceedings of the Royal Society» опубликовал статью П.Дирака [6], в которой он предложил новое волновое уравнение

$$\left[c\vec{\alpha}\vec{p} + \beta mc^2\right]\Psi = E\Psi. \tag{13}$$

Главным его отличием была *линейность* по импульсам — слагаемое $p^2/2m$ отсутствовало, но операторы оставались прежними: $p_0 = i\partial/\partial t$, $\vec{p} = -i\nabla$. Кроме того, были введены коэффициенты α и β с необычным свойством

$$\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = 2\sigma_{\mu\nu}, \tag{14}$$

которое означало, что каждый из них — это матрица. Они имеют размер 4×4 и называются матрицами Дирака (он привёл их в явном виде). Волновая функция Ψ — 4-мерный столбец (биспинор), обычно записывается в виде двух спиноров: $\Psi = \begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$.

Смысл этих новшеств состоял в том, чтобы добиться автоматического выполнения знаменитого соотношения А.Эйнштейна

$$c^2p^2 + m^2c^4 = E^2. \tag{15}$$

Чтобы момент количества движения $\vec{J}$ коммутировал с вектором $\vec{\alpha}$ по общему правилу

$$[J_i, \alpha_k] = i\varepsilon_{ikl}\alpha_l, \tag{16}$$

необходимо включить в $\vec{J}$ дополнительное слагаемое $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, коммутирующее с $\vec{\alpha}$ согласно (16). Нетрудно проверить, что этому требованию удовлетворяет вектор $\vec{S} = \vec{\sigma}/2$, чей квадрат 3/4 свидетельствует о спине электрона, равном 1/2.

При сложении моментов возможны два варианта $j = l \pm 1/2$; этому служат два упомянутых спинора: «верхний» φ с моментом $j = l + 1/2$ и «нижний» χ с $j = l - 1/2$. Вот почему нужны два спинора и 4-компонентная волновая функция! При заданном j чётности спиноров $P = (-1)^l$ противоположны.

Если электрон находится в электромагнитном поле, имеющем потенциал A_μ, то уравнение принимает вид (e — заряд электрона)

$$[\gamma_\mu(p_\mu - eA_\mu) + m]\Psi = 0. \tag{17}$$

Градиентное преобразование $A_\mu \to A_\mu + \partial\eta/\partial x_\mu$ компенсируется преобразованием волновой функции $\Psi \to e^{i\eta}\Psi$, так что $\Pi_\mu = p_\mu - eA_\mu$ остаётся неизменным: имеет место калибровочная инвариантность.

Сравнивая $\vec{\Pi}$ с вектором Гамильтона (8), обнаруживаем их тождество. В уравнение (17) входит и четвёртая компонента калибровочного импульса.

2б. Энергетический спектр

Обратимся теперь к нашей задаче — движению электрона в кулоновском поле:

$$eA_0 = -\frac{Z\alpha}{r}; \;\; e\vec{A} = 0. \tag{18}$$

Чтобы отделить уравнения для спиноров φ и χ друг от друга, перейдём к уравнению 2-го порядка

$$[(\gamma_\mu \Pi_\mu)^2 - m^2]\Psi = 0. \tag{19}$$

В выражении $(\gamma_\mu\Pi_\mu)^2 = (\Pi_\mu)^2 + e\gamma_\mu\gamma_\nu F_{\mu\nu}$ только одна матрица $\gamma_\mu\gamma_\nu$ связывает эти спиноры. Её можно сделать диагональной, если выбрать матрицы в виде $\gamma_0 = \rho_1$ и $\vec{\gamma} = i\rho_2\vec{\sigma}$. Любой другой выбор, в частности $\gamma_0 = \rho_3$ и $\vec{\gamma} = \rho_1\vec{\sigma}$, принятый Дираком, Гордоном, Дарвином и многими другими, этому требованию не удовлетворяет.

В результате $(\gamma_\mu\Pi_\mu)^2 = (\Pi_0)^2 - (\vec{\Pi})^2 - e\vec{\sigma}(\vec{\mathcal{H}} - \rho_3\vec{\varepsilon})$.

Слагаемое $\vec{\sigma}\vec{\mathcal{H}}$ (взаимодействие магнитных моментов электрона и протона) приводит к сверхтонкой структуре уровней и, ввиду своей малости, может быть отброшено. Однако, в случае наличия внешнего поля оно приводит к магнитному моменту $e\hbar/2mc$, равному магнетону Бора. Второе слагаемое $e\vec{\sigma}\vec{\varepsilon}$ — это спин-орбитальное взаимодействие, часть тонкой структуры уровней.

Окончательно радиальное уравнение принимает вид ($\vec{\mathcal{H}} = 0$, $\vec{\varepsilon} = Ze\vec{n}r^{-2}$)

$$\left\{\left(E + \frac{Z\alpha}{r}\right)^2 + \nabla^2 \pm \frac{Z\alpha}{r^2}\vec{\sigma}\vec{n} - m^2\right\}\binom{\varphi}{\chi} = 0, \tag{20}$$

очень похожий на уравнение нерелятивистской теории (2). Чтобы убедиться в этом, раскроем скобки, введём импульс $k^2 = E^2 - m^2$ и, разделив на $(-2ik)^2$, увидим уравнение Уиттекера

$$\left\{\frac{1}{\rho}\partial^2\rho - \frac{1}{4} + i\frac{EZ\alpha/k}{\rho} - \frac{\vec{L}^2 - (Z\alpha)^2 - iZ\alpha\vec{\sigma}\vec{n}}{\rho^2}\right\}\varphi = 0 \tag{21}$$

с незначительными изменениями: кулоновский параметр равен $Z\alpha E/k$, т.е. прежнему $Z\alpha/\nu$, но с релятивистским определением скорости $\nu = k/E$; в последнем члене вместо $l(l + 1)$ стоит некоторая комбинация, обозначив которую $\gamma(\gamma + 1)$, мы сможем написать решение радиального уравнения Дирака в виде

$$\varphi(\rho) = \frac{1}{\rho}\mathcal{M}_{\xi\gamma}(\rho) = e^{-\rho/2}\rho^{c/2-1}\Phi(a;c|\rho),$$

аналогичном формуле (3) с заменой l на γ. Итак,

$$\varphi(r) = e^{ikr}r^\gamma\Phi(a;c|-2ikr), \; a = \gamma + 1 - i\xi, \; c = 2\gamma + 2. \tag{22}$$

Требование квадратичной интегрируемости по-прежнему квантует параметр $a = -n_r$, так что $i\xi = n_r + \gamma + 1$, откуда следует $\nu = \frac{Z\alpha}{iN}$ и выражение для энергии

$$E = \frac{m}{\sqrt{1-\nu^2}} = \frac{m}{\sqrt{1+\left(\frac{Z\alpha}{N}\right)^2}}, \tag{23}$$

в которое следует подставить значение параметра γ (которое будет получено ниже).

В заключение замечание: знак минус в уравнении (20) для спинора χ влияет только на его угловую зависимость, не меняя энергии уровня.

2в. Симметрия. Позитрон

Как мы видели, уравнение Уиттекера появляется во всех кулоновских задачах. Чем объясняется это свойство? Этим свойством является *симметрия* — группа преобразований, одним из генераторов которой является гамильтониан.

Этой группой не может быть группа В.Фока O(4), поскольку гамильтониан коммутирует со всеми её генераторами.

В разделе 1в на примере импульсного подхода к задаче Кулона мы видели, что уравнение Уиттекера обладает некомпактной алгеброй O(2,1). Прямой проверкой можно установить, что этой алгеброй обладают и другие рассмотренные нами задачи.

Алгебры В.Фока O(4) и Ю.Румера O(2,1) независимы друг от друга, так что мета-алгебра атома водорода есть их прямое произведение O(4)×O(2,1), которое является одной из подгрупп алгебры O(4,2).

O(4,2) имеет 6·5/2 = 15 генераторов, которые включают 6 «фоковских» и 3 «румеровских», остальные шесть — это 3 оператора растяжений и 3 оператора инверсий. Эти операторы делают её конформной, что, конечно, не меняет 4-мерности нашего Мира (подробнее см. [13]).

Наряду с непрерывными группами волновые уравнения могут располагать и дискретными, например — отражением координат (чётностью), сопряжением по заряду и другими. Нас будет интересовать уравнение Дирака с противоположным знаком перед массой

$$\left[\gamma_\mu(p_\mu - eA_\mu) + m\right]\Psi' = 0, \tag{24}$$

которое даёт такой же квадрат, что и уравнение (17)***. Оно обладает решениями, полностью аналогичными полученным в предыдущем разделе.

Чему соответствует это уравнение? Его можно привести к прежнему виду, просто заменив знаки

$$\left[\gamma_\mu(-p_\mu + eA_\mu) + m\right]\Psi' = 0, \tag{25}$$

однако и тогда этот объект не будет совпадать с обычным электроном, так как у него противоположный знак заряда и двигается он в противоположном направлении. Все эти свойства отражены в его волновом уравнении, *не совпадающем* с уравнением Дирака!

Итак, наряду с «обычным» электроном возможно существование родственной частицы с такой же массой, но с положительным электрическим зарядом! В 1928 г. таких частиц не знали — впервые их обнаружил К.Андерсон в 1932 г. в космических лучах [14]. Так разрешилась загадка о частице с отрицательной массой, мучавшей физиков четыре года. Её назвали *позитроном*.

Позитрон может образовывать с электроном систему, похожую на атом водорода, — позитроний, который, однако, неустойчив и распадается на два или три γ-кванта в зависимости от величины углового момента.

2г. Угловые функции

Выше мы уклонились от вычисления угловой части волновой функции, заменив её собственным значением $\gamma(\gamma + 1)$. Восполним этот пробел.

Оператор $\hat{O} = \vec{L}^2 - (Z\alpha)^2 - iZ\alpha\vec{\sigma}\vec{n}$ равен $\mathcal{L}(\mathcal{L}+1)$, где

$$\mathcal{L} = \beta(1+\vec{\sigma}\vec{L}) - iZ\alpha\vec{\sigma}\vec{n}. \tag{26}$$

оператор, предложенный К.А.Джонсоном [15]. Там же доказано равенство $\hat{O} = \mathcal{L}(\mathcal{L}+1)$. Оба оператора, $\hat{O}$ и $\mathcal{L}$, имеют общую угловую функцию $\Omega_{jl\mu}(\vec{n}) = C(j\mu; lm, 1/2s)Y_{lm}\varphi_{1/2s}$ для верхнего спинора и $\Omega_{j\bar{l}\mu}(\vec{n})$ для нижнего $(\bar{l} = 2j - l)$, однако гораздо удобнее пользоваться собственными функциями оператора $\mathcal{L}$-полиномами И.Тамма.

Собственные значения оператора Джонсона равны $\gamma = \pm\sqrt{(j+1/2)^2 - (Z\alpha)^2}$, поскольку при возведении в квадрат слагаемые оператора $\mathcal{L}$ антикоммутируют. Этим объясняется появление $\gamma(\gamma + 1)$ в формуле (21). Знак γ положителен у верхнего и отрицателен у нижнего спинора, но это не влияет на энергию уровня, так как компенсируется увеличением радиального квантового числа, входящего в сумму $N = n_r + \gamma + 1$.

*** Такие решения неизбежны в теории относительности, поскольку они содержит квадрат массы.

III. Старшие поправки

3а. Радиационные поправки

Первый возбуждённый уровень атома водорода $n = 2$ давно привлекал внимание спектроскопистов, так как на него опирается серия Бальмера, наблюдаемая в видимой части спектра; в конце XIX в. А.Майкельсон установил его тонкую структуру, а в 30-х гг. XX в. специалисты отмечали необычную форму линии H_α.

В 1947 г. В.Лэмб обнаружил, что на месте вырожденного уровня $2S_{1/2} + 2P_{1/2}$ в атоме водорода наблюдается дублет уровней, отличающихся чётностью. Это означало, что в теории Дирака что-то не учтено.

Вырождение энергетического уровня объясняется наличием двух некоммутирующих интегралов движения, оно снимается любым возмущением, нарушающим сохранение одного из них. После ряда неудачных предложений теоретики пришли к выводу, что таким возмущением является динамическая часть электромагнитного поля, в котором движется электрон. О ней обычно вспоминают, говоря о флуктуациях вакуума. Т.Вельтон показал, что эти флуктуации как бы «подталкивают» электрон — нечто вроде броуновского движения — и эта неопределённость его положения создаёт эффект. В том же 1947 г. Г.Бете реализовал эту идею.

В предыдущих разделах мы считали поле статическим и пренебрегали его динамической частью (флуктуациями вакуума). Её учёт относится к квантовой электродинамике и выходит за рамки механики, пусть даже релятивистской. Её основным методом является теория возмущений – разложение по параметру $\alpha = e^2/\hbar c$, например поправка к энергии равна

$$\Delta E = \sum_{n=1} \varepsilon_n \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^n \tag{27}$$

n равно числу петель в диаграмме Фейнмана. Множитель $\frac{\alpha}{\pi}$ возникает при вычислении интеграла по петле.

Бете вычислил первую (n = 1) поправку к $2S$-уровню с помощью нерелятивистского приближения:

$$\Delta E_B = \frac{4}{3}\frac{\alpha m}{\pi}\frac{(Z\alpha)^4}{N^3}\ln\frac{Ry}{\varepsilon}, \; N = 2. \tag{28}$$

Вывод её не прост, и я могу только прокомментировать эту формулу. Обозначения таковы: m — масса электрона (необходима по размерности), $\frac{\alpha}{\pi}$ — признак первой поправки, $\frac{(Z\alpha)^4}{N^3}$ — тонкая структура N-го уровня, Ry — постоянная Ридберга, ε — средняя энергия возбуждения (≈15 эВ). Логарифм возник в результате вычисления интеграла по фото-электронной петле, поэтому он зависит от Ry. Следует заметить, что многие эффекты квантовой электродинамики выражаются логарифмами, часто это обусловлено простыми соображениями размерности. В целом формула Бете даёт около 95% наблюдаемого сдвига.

Теоретическое вычисление лэмбовского сдвига доведено до большой точности 1057,871(02) МГц, сравнимой с измеренным 1057,851(2) МГц (расхождение связывают с оценкой радиуса протона).

Приведу результаты вычислений старших поправок к основному состоянию атома водорода (все числа даны в МГц, в скобках указан порядок приближения):

1-петлевой вклад: +1077,640 $[\alpha(Z\alpha)^4]$ +7,140 $[\alpha(Z\alpha)^5]$ –0,372 $[\alpha(Z\alpha)^6]$ – 27,084 (вклад поляризации вакуума порядка $\alpha(Z\alpha)^4$).

2-петлевой вклад: +0,342 $[\alpha^2(Z\alpha)^4]$ — 0,239 (поляризация вакуума порядка $\alpha^2(Z\alpha)^4$).

Поправки на движение ядра: +0,319 и его размер +0,125.

Вклад одного лишь 1-петлевого вклада составляют 0,9995 часть правильного значения, однако при точности эксперимента $\sim 10^{-6}$ отбросить поправки, имеющие порядок $\sim 10^{-4}$, нельзя.

IV. Заключение

Что дали нам прочитанные десять страниц? Думаю, что многое, и прежде всего, удивительное свойство кулоновой задачи — её решение, независимо от кинематики, удовлетворяет уравнению Уиттекера.

Вероятно, лучше всего выразить это иначе: симметрией кулоновой проблемы является конформная группа O(2,1). И не только она, ещё и изотропная O(3). Два интеграла — $\vec{h}$ и $\vec{L}$ — сердце этой задачи. Её конкретные проявления — лестничный спектр связанных состояний и резерфордова структура амплитуды рассеяния — следствия найденной симметрии.

Второй результат, калибровочная структура — гигантское обобщение электродинамики, росток будущей теории микрочастиц (лептонов и кварков) — тоже коренится в интеграле Гамильтона и его релятивистском обобщении, скаляре $\gamma_\mu \Pi_\mu$. За ними маячит суперсимметрия микромира или что-то похожее на неё.

1. Rutherford E. The scattering of α and β particles by matter and the structure of the atom // Phil. Mag. 1911. Vol.21(125). P.669-688. DOI: https://doi.org/10.1080/14786440508637080
2. Bohr N. On the constitution of atoms and molecules // Phil. Mag. 1913. Vol.26(151). P.1–25. DOI: https://doi.org/10.1080/14786441308634955
3. Heisenberg W. Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen // Z. Physik. 1925. Vol.33(1). P.879–893. DOI: https://doi.org/10.1007/BF01328377
4. Dirac P.A.M. The fundamental equations of quantum mechanics // Proc. Roy. Soc. A. 1925. Vol.109(752). P.642–653. DOI: https://doi.org/10.1098/rspa.1925.0150
5. Schrodinger E. Quantisierung als Eigenwertproblem // Ann. Phys. 1926. Vol.384(4). P.361-376. DOI: https://doi.org/10.1002/andp.19263840404
6. Dirac P.A.M. The quantum theory of the electron // Proc. Roy. Soc. A. 1928. Vol.117(778). P.610–624. DOI: https://doi.org/10.1098/rspa.1928.0023
7. Новейшее развитие квантовой электродинамики: Сб. ст. / Под ред. Д.Д.Иваненко. М.: Иностранная литература, 1954. 394 с.
8. Podolsky B., Pauling L. The momentum distribution in hydrogen-like atoms // Phys. Rev. 1929. Vol.34(1). P.109–116. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRev.34.109
9. Hilleraas E.A. Die Wellengleichung des Keplerproblems im Impulsraume // Z. Phys. 1932. Vol.74. P.216–223. DOI: https://doi.org/10.1007/BF01342375
10. Fock W.A. Zur Theorie des Wasserstoffatoms // Z. Phys., 1935. Vol.98. P.145–154. DOI: https://doi.org/10.1007/BF01336904
11. Hamilton W.R. The Hodograph or a new method of expressing in symbolical language the Newtonian Law of Attraction // Proc. Roy. Irish Acad. 1847. Vol.3. P.344–353.
12. Dmitriev V.F., Rumer Yu.B. O(2,1) Algebra and the hydrogen atom // Theoret. and Math. Phys. 1970. Vol.5. P.1146–1149. DOI: https://doi.org/10.1007/BF01036108
13. Дубровин Б.А., Новиков С.П., Фоменко А.Т. Современная геометрия. Методы и приложения. М.: Наука, 1986. 760 с.
14. Anderson C.D. The Positive Electron // Phys. Rev. 1933. Vol.43. P.491–494. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRev.43.491
15. Martin H.C., Glauber R. Relativistic theory of radiative orbital electron capture // Phys. Rev. 1958. Vol.109(4). P.1307–1325. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRev.109.1307

References

1. Rutherford E. The scattering of α and β particles by matter and the structure of the atom. Phil. Mag., 1911, vol. 21(125), pp. 669–688. doi: https://doi.org/10.1080/14786440508637080
2. Bohr N. On the constitution of atoms and molecules. Phil. Mag., 1913, vol. 26(151), pp. 1–25. doi: https://doi.org/10.1080/14786441308634955
3. Heisenberg W. Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen. Z. Physik, 1925, vol. 33(1), pp. 879–893. doi: https://doi.org/10.1007/BF01328377
4. Dirac P.A.M. The fundamental equations of quantum mechanics. Proc. Roy. Soc. A., 1925, vol. 109(752), pp. 642–653. doi: https://doi.org/10.1098/rspa.1925.0150
5. Schrodinger E. Quantisierung als Eigenwertproblem. Ann. Phys., 1926, vol. 384(4), pp. 361–376. doi: https://doi.org/10.1002/andp.19263840404
6. Dirac P.A.M. The quantum theory of the electron. Proc. Roy. Soc. A., 1928, vol. 117(778), pp. 610–624. doi: https://doi.org/10.1098/rspa.1928.0023
7. Noveysheye razvitiye kvantovoy elektrodinamiki: Sb. st. [The latest development of quantum electrodynamics: collection of articles]. Ed. D.D.Ivanenko. Moscow, Inostrannaya literatura Publ., 1954. 394 p.
8. Podolsky B., Pauling L. The momentum distribution in hydrogen-like atoms. Phys. Rev., 1929, vol. 34(1), pp. 109–116. doi: https://doi.org/10.1103/PhysRev.34.109
9. Hilleraas E.A. Die Wellengleichung des Keplerproblems im Impulsraume. Z. Phys., 1932, vol. 74, pp. 216–223. doi: https://doi.org/10.1007/BF01342375
10. Fock W.A. Zur Theorie des Wasserstoffatoms . Z. Phys., 1935, vol. 98, pp. 145–154. doi: https://doi.org/10.1007/BF01336904
11. Hamilton W.R. The Hodograph or a new method of expressing in symbolical language the Newtonian Law of Attraction. Proc. Roy. Irish Acad., 1847, vol. 3, pp. 344–353.
12. Dmitriev V.F., Rumer Yu.B. O(2,1) Algebra and the hydrogen atom. Theoret. and Math. Phys., 1970, vol. 5, pp. 1146–1149. doi: https://doi.org/10.1007/BF01036108
13. Dubrovin B.A., Novikov S.P., Fomenko A.T. Sovremennaya geometriya. Metody i prilozheniya [Modern geometry. Methods and applications]. Moscow, Nauka Publ., 1986. 760 p.
14. Anderson C.D. The Positive Electron. Phys. Rev., 1933, vol. 43(6), pp. 491–494. doi: https://doi.org/10.1103/PhysRev.43.491
15. Martin H.C., Glauber R. Relativistic theory of radiative orbital electron capture. Phys. Rev., 1958, vol. 109(4), pp. 1307–1325. doi: https://doi.org/10.1103/PhysRev.109.1307