Теория возмущений

7.1 Общие положения

- Ранее были изложены основы теории излучения поля. Теперь рассмотрим методы, с помощью которых можно получить физические результаты.
- Поведение системы описывается волновой функцией или амплитудой состояния $\Psi(t)$, удовлетворяющей волновому уравнению

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi.$$

- Здесь H — полный гамильтониан, содержащий вклады от поля излучения H_{rad}, электронов H_{el}, и их взаимодействия с электромагнитным полем H_{int}.
- Внешнее поле или кулоновское взаимодействие между частицами включается в H_{el}, либо в член, описывающий взаимодействие H_{int}.
- Пусть $H_0 = H_{rad} + H_{el}$ — энергия невзаимодействующих поля излучения и электронов.

7.1 Общие положения

- Если рассмотреть представление взаимодействия, то

$$i\hbar\frac{\partial\Psi'}{\partial t} = H'_{int}\Psi', \qquad H'_{int} = e^{iH_0t/\hbar}H_{int}e^{-H_0t/\hbar} \qquad (7.1)$$

- Обозначим через Ψ_n собственное состояние оператора H_0, где индекс n включает все квантовые числа, описывающие систему фотонов и электронов, не взаимодействующих между собой.
- Пусть энергия системы в состоянии n будет E_n.
- Точное решение уравнения (7.1) можно разложить по функциям Ψ_n:

$$\Psi'(t) = \sum_n b_n(t)\Psi_n\,, \qquad (7.2)$$

- $|b_n(t)|^2$ есть вероятность того, что система в момент времени t находится в невозмущенном состоянии n.
- Если подставить это разложение в (7.1), умножить на Ψ_n^* и проинтегрировать по всем переменным, от которых зависит Ψ_n , то можно получить

7.1 Общие положения

- $$i\hbar\dot{b}_n(t) = \sum_m H'_{int\,n|m}\, b_m(t)$$
- где $H'_{int\,n|m}$ — матричный элемент H'_{int} для перехода $m \to n$.
- Так как оператор H_0 диагонален, то действуя на функцию Ψ_n, умножает ее на E_n, поэтому

$$H'_{int\,n|m} = H_{n|m} e^{i(E_n - E_m)t/\hbar}$$

$$i\hbar\dot{b}_n(t) = \sum_m H_{n|m} e^{\frac{i(E_n - E_m)t}{\hbar}} b_m(t) \qquad (7.3)$$

- Величина $H_{n|m}$ не зависит от t и равна матричному элементу не зависящего от времени оператора H_{int}.

7.1 Общие положения

- Матричные элементы $H_{n|m}$ отличны от нуля, если числа фотонов в состояниях m и n отличаются друг от друга на единицу.

$$i\hbar\dot{b}_n(t) = \sum_m H_{n|m} e^{\frac{i(E_n - E_m)t}{\hbar}} b_m(t) \qquad (7.3)$$

- Если уравнение (7.3) выписать явно, то оно представит собой систему бесконечного числа уравнений —по одному на каждый стоящий в левой части коэффициент разложения b.
- Далее можно воспользоваться теорией возмущения, рассматривая взаимодействие с излучением H'_{int} как малую величину.

7.2 Вероятность перехода

- Большинство задач в теории излучения связано с вычислением вероятностей перехода.
- Пусть в момент времени $t \; = 0$ система находится в определенном невозмущенном состоянии с индексом 0:

$$b_0(0) = 1, \qquad b_n(0) = 0 \qquad (n \neq 0) \qquad (7.4)$$

- Под действием возмущения H'_{int} оно будет изменяться с течением времени, и некоторые из b_n станут отличными от нуля.
- В первом приближении будут отличны от нуля такие коэффициенты b_n, которые относятся к состояниям с числом фотонов, отличным от исходного на единицу.

7.2 Вероятность перехода

- Таким образом, в первом приближении

$$i\hbar\dot{b}_n = H_{n|0} b_0 e^{i(E_n - E_0)t/\hbar}, \qquad (7.5а)$$

$$i\hbar\dot{b}_0 = \sum_n H_{0|n} b_n e^{i(E_0 - E_n)t/\hbar}, \qquad (7.5б)$$

- Далее, в качестве b_0 в (7.5а) можно подставить выражение (7.4): $b_0(0) = 1$.
- Это верно лишь для сравнительно малых времен t, пока b_0 еще не изменилось заметно, но этого достаточно для вычисления вероятности перехода за единицу времени.
- Тогда решение, удовлетворяющее начальному условию (7.4), будет

$$b_n(t) = H_{n|0} \frac{e^{\frac{i(E_n - E_0)t}{\hbar}} - 1}{E_0 - E_n} \qquad (7.6)$$

7.2 Вероятность перехода

- Вероятность обнаружить систему в момент t в состоянии n, если, при $t = 0$ она была в невозмущенном состоянии 0, равна

$$|b_n(t)|^2 = \left|H_{n|0}\right|^2 2\frac{1 - \cos(E_n - E_0)t/\hbar}{(E_0 - E_n)^2}. \qquad (7.7)$$

- Далее можно пренебречь очень короткими промежутками времени t (порядка одного периода $\hbar/E_n$).
- Несмотря на предположение о достаточной малости t по сравнению с временем жизни исходного состояния 0 (за время t величина b_0 не изменяется заметно), в равенстве (7.7) возможно перейти к пределу $t \to \infty$.
- Это означает, что $t \gg \hbar/E_n$ или $\hbar/E_0$.
- При $t \to \infty$ множитель, содержащий t, есть умноженное на t представление δ-функции.
- Поэтому можно получить

7.2 Вероятность перехода

- $$\frac{1}{t}|b_n(t)|^2 = \frac{2\pi}{\hbar}\left|H_{n|0}\right|^2 \delta(E_n - E_0) \qquad (7.8)$$
- Левая часть равенства (7.8) есть вероятность перехода за единицу времени из состояния 0 в состояние n.
- Наличие δ-функции означает, что энергия сохраняется и переходы происходят лишь между состояниями с равной невозмущенной энергией.
- Формула (7.8) с δ-функцией справа имеет определенный смысл, лишь тогда, когда можно интегрировать по E_n или E_0, т.е. если одно из двух состояний принадлежит непрерывному спектру.
- Далее можно умножить (7.8) на число состояний $\rho_n dE_n$ с энергией в интервале dE_n и проинтегрировать по E_n.

7.2 Вероятность перехода

- $$w_{n|0} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| H_{n|0} \right|^2 \rho_n \quad (7.9)$$
- Последнее дает искомую вероятность перехода за единицу времени в первом приближении. Эта формула будет использована при изучении испускания и поглощения света.

- Рассмотрим рассеяние фотона электроном.
- Здесь должны измениться два числа заполнения n_λ: первичный фотон должен поглотиться, а вторичный (рассеянный) испуститься.
- В (7.9) допускается изменение лишь одного „фотонного" числа заполнения. Чтобы описать этот процесс, необходимо перейти к следующему приближению, допуская появление двух сомножителей H.
- Напишем вместо (7.5)

7.2 Вероятность перехода

- $$i\hbar\dot{b}_{n'} = H_{n'|0} b_0 e^{i(E_{n'} - E_0)t/\hbar}, \qquad (7.10а)$$

$$i\hbar\dot{b}_n = \sum_n H_{n|n'} b_{n'} e^{i(E_n - E_{n'})t/\hbar}, \qquad (7.10б)$$

- Состояния n' отличаются от исходного 0 на один фотон, а n' от n — также на один фотон. Таким образом, n отличается от 0 на два фотона.
- Нужно рассматривать лишь такие состояния n', которые могут осуществить указанную связь между начальным и конечным состояниями 0 и n.
- Такие состояния называются промежуточными или виртуальными.
- По аналогии с предыдущим случаем решается (7.10) с подстановкой $b_0 = 1$.

7.2 Вероятность перехода

- $$b_{n'} = \frac{H_{n'|0}}{E_0 - E_{n'}} e^{\frac{i(E_{n'} - E_0)t}{\hbar}} \qquad (7.11)$$

$$i\hbar \dot{b}_n = \sum_{n'} \frac{H_{n|n'} H_{n'|0}}{E_0 - E_{n'}} \, e^{i(E_n - E_0)t/\hbar}, \qquad (7.12)$$

- Если заменить $H_{n|0}$ составным матричным элементом

$$K_{n|0} = \sum_{n'} \frac{H_{n|n'} H_{n'|0}}{E_0 - E_{n'}}$$

- то из уравнения (7.12) можно получить вероятность перехода за единицу времени

$$w_{n|0} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{H_{n|n'} H_{n'|0}}{E_0 - E_{n'}} \right|^2 \rho_n \quad (7.13)$$

- Этот способ можно продолжить, рассматривая все более сложные радиационные процессы, требующие еще большего числа шагов с большим количеством промежуточных, состояний.

Радиационные процессы в первом приближении

8.1 Общие положения

- Атом и поле излучения образуют две квантовомеханические системы с энергией взаимодействия H_{int}.
- Это взаимодействие (возмущение) является причиной следующих переходов невозмущенной системы (атом + излучение):
- а) перехода атома из одного квантового состояния в другое
- б) испускания или поглощения световых квантов.
- Поле излучения имеет непрерывный спектр. Если излучается или поглощается световой квант с импульсом $\mathbf{k}$ $(k = \hbar v)$, его можно приписать на выбор какому-нибудь одному из очень большого числа радиационных осцилляторов:

$$\rho_k dk = \frac{k^2 dk d\Omega}{(2\pi\hbar c)^3} \qquad (8.1)$$

- имеющих одну и ту же частоту, одно и то же направление распространения и одинаковую поляризацию.
- Если пренебречь эффектами, связанными с шириной уровня, то энергия невозмущенной системы сохраняется во всех переходах, в которых испускаются или поглощаются световые кванты.

8.1 Общие положения

- Взаимодействие между атомом и полем излучения может вызвать радиационные переходы, когда в начальном состоянии нет световых квантов.
- Если атом возбужден в начальном состоянии, то при переходе в конечное состояние будет излучен световой квант. Такой процесс представляет собой спонтанное излучение света.
- В первом приближении испускается или поглощается лишь один световой квант. Такие переходы происходят прямо без промежуточных состояний. Вероятности переходов даются матричными элементами энергии взаимодействия H_{int} для прямого перехода из начального состояния в конечное.
- В теории излучения и поглощения можно ограничиться нерелятивистским приближением, поэтому будем использовать следующее взаимодействие:

$$H_{int} = -\frac{e}{\mu}(\mathbf{pA}) \qquad (8.2)$$

- Второй член, пропорциональный A^2, приводит к переходам, в которых участвуют два кванта, поэтому этим членом можно пренебречь.

8.1 Общие положения

- Матричные элементы оператора (8.2) для излучения или поглощения кванта с импульсом $\mathbf{k}_\lambda$ даются формулами:

$$H_{an_{\lambda+1}|bn_\lambda} = H^*_{an_{\lambda+1}|bn_\lambda} = -\frac{e}{\mu}\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2 c^2}{k_\lambda}}\sqrt{n_\lambda + 1}\int \psi_a^* \, p_e e^{-(\boldsymbol{\chi}_\lambda \, \mathbf{r})i}\psi_b \quad (8.2')$$

- где p_e — компонента импульса электрона $\mathbf{p}$ в направлении поляризации фотона $\mathbf{k}_{\boldsymbol{\lambda}}$;
- $\boldsymbol{\chi}_\lambda = \mathbf{k}_{\boldsymbol{\lambda}}/\hbar c$- вектор направления распространения фотона.
- Для простоты ограничимся случаем одного электрона.

8.2 Излучение

- Вычислим сначала вероятность излучения света.
- Предположим, что имеются два невырожденных атомных состояния a, b с энергиями $E_b > E_a$.
- Согласно закону сохранения энергии, могут излучаться лишь световые кванты с энергией

$$k = \hbar\nu = E_b - E_a \qquad (8.3)$$

- Уравнение (8.3) -- условие частот Бора.
- Вероятность перехода за единицу времени, согласно (7.9), будет равна

$$w_{n|0} = \frac{2\pi}{\hbar}\rho_E |H|^2 \qquad (8.4)$$

- где ρ_E -- число конечных состояний с энергиями между E и $E + dE$. В качестве ρ_E подставляется число радиационных осцилляторов ρ_k.
- Энергия конечного состояния равна $k + E_a = E$, и потому $dE = dk$, $\rho_E = \rho_k$.
- Подставляя уравнение (8.1) и выражение для матричных элементов (8.2’) в формулу (8.4), можно получить:

8.2 Излучение

- Вероятность излучения светового кванта за единицу времени:

$$wd\Omega = \frac{e^2}{\mu^2}\frac{\nu d\Omega}{2\pi\hbar c}\left|\left(p_e e^{-i(\boldsymbol{\chi}\mathbf{r})}\right)_{ab}\right|^2 (\overline{n}_\nu + 1). \quad (8.5)$$

- Можно предположить, что длина волны излученного света $1/\chi$ велика по сравнению с размерами атома. Если обозначить энергию атома через E, то длина волны составит по порядку величины

$$\lambda \sim \frac{\hbar c}{E} \qquad (8.6)$$

- С другой стороны, размеры атома a примерно равны

$$E \sim \frac{e^2}{a} \qquad \text{или} \qquad a \sim \frac{e^2}{E}. \qquad (8.7)$$

- Поскольку $\hbar c/e^2 = 137$, то λ велико по сравнению с a.
- Поэтому множитель $e^{-i(\boldsymbol{\chi}\mathbf{r})}$ в формуле (8.5) можно опустить, так как он почти постоянен в области, где ψ_a или ψ_b отличны от нуля.
- Вводя обозначение Θ для угла между направлением поляризации и вектором **v**, можно найти для вероятности перехода

8.2 Излучение

- $$wd\Omega = \frac{e^2 \nu d\Omega}{2\pi\hbar c^3} |\mathbf{v}_{ab}|^2 \cos^2\Theta \, (\overline{n}_\nu + 1) \qquad (8.8)$$

- где $|\mathbf{v}_{ab}|^2 = v_{xab}^2 + v_{yab}^2 + v_{zab}^2$, причем v_{xab} — матричный элемент x-компоненты скорости v, соответствующий переходу $b \to a$.
- Так как в квантовой теории
$$v_{xab} \equiv \dot{x}_{ab} = -i\nu x_{ab},$$
- получаем
$$wd\Omega = \frac{e^2 \nu^3 d\Omega}{2\pi\hbar c^3} |\mathbf{x}_{ab}|^2 \cos^2\Theta \, (\overline{n}_\nu + 1) \qquad (8.9)$$
- Согласно формуле (8.9) вероятность излучения состоит из двух частей.
- Первая часть не зависит от интенсивности радиации, имевшейся до излучения. Она соответствует спонтанному излучению и отлична от нуля, даже если $\overline{n}_\nu = 0$.
- Вторая часть пропорциональна интенсивности радиации $\overline{n}_\nu$ частоты ν, имевшейся до процесса излучения. Она приводит к вынужденному излучению.

8.2 Излучение

- Полную интенсивность излучения за единицу времени можно получить из формулы (8.9), если умножить ее на $\hbar\nu$ и проинтегрировать по всем углам.
- Суммируя сначала по направлениям поляризации, можно получить $\sin^2\theta$ вместо $\cos^2\Theta$, где θ— угол между вектором $\mathbf{x}$ (положение электрона по отношению к ядру) и направлением распространения $\mathbf{k}$.
- Для спонтанного излучения: $S d\Omega = \frac{e^2\nu^4 d\Omega}{2\pi c^3}\ |\mathbf{x}_{ab}|^2 \sin^2\theta \qquad (8.10)$
- (8.10) дает интенсивность излучения за единицу времени в направлении $\mathbf{k}$.
- Полная интенсивность получается интегрированием (8.10) по всем углам

$$S = \frac{4}{3}\frac{e^2}{c^3}\nu^4|\mathbf{x}_{ab}|^2 \qquad (8.11)$$

- Формулы (8.10) и (8.11) почти тождественны с формулами классической теории. В последних следует заменить среднее по времени от координаты осциллятора $\overline{x^2}$ матричным элементом той же величины, соответствующим переходу $b \rightarrow a$.

8.2 Излучение

- $$wd\Omega = \frac{e^2\nu^3 d\Omega}{2\pi\hbar c^3}|\mathbf{x}_{ab}|^2 \cos^2\Theta\,(\overline{n}_\nu + 1) \qquad (8.9)$$
- Порядок величины вероятности перехода за единицу времени составит, согласно формулам (8.9), (8.6), (8.7) (полагая $x_{ab} \sim a$),

$$w \sim \frac{e^2}{\hbar c^3}\nu^3 a^2 \sim \frac{1}{137}\left(\frac{\nu a}{c}\right)^2 \nu \sim \frac{\nu}{(137)^3} \qquad (8.12)$$

- т. е. порядка 10^8 сек.$^{-1}$ для оптической области,
- 10^{11}сек.$^{-1}$ для рентгеновских лучей и 10^{14} сек.$^{-1}$ для γ-лучей.
- Результат не зависит от массы излучающей частицы, однако зависит от заряда.

8.3 Поглощение

- Аналогично можно вычислить вероятность поглощения светового кванта.
- Рассмотрим пучок света интенсивности $I_0(\nu)d\nu$, приходящий из заданного направления внутри элемента телесного угла $d\Omega$.
- Поглощаемый световой квант может быть у любого радиационного осциллятора из интервала частот $d\nu$.
- Если в начальном состоянии среднее число квантов на осциллятор равно $\overline{n}_\nu$ то интенсивность $I_0(\nu)$ дается формулой

$$I_0(\nu)d\nu = \overline{n}_\nu \hbar\nu c \frac{k^2 dk d\Omega}{(2\pi\hbar c)^3} = \overline{n}_\nu \ \frac{\nu^3 d\Omega \mathrm{d}\nu}{(2\pi)^3 c^2}\hbar \qquad (8.13)$$

- Суммирование по всем таким радиационным осцилляторам дает для вероятности перехода за единицу времени снова формулу (8.4), где ρ_E — уже число начальных состояний.

$$w_{n|0} = \frac{2\pi}{\hbar}\rho_E |H|^2 \qquad (8.4)$$

8.3 Поглощение

- $$wd\Omega = \frac{e^2}{\mu^2}\,\frac{\nu d\Omega}{2\pi\hbar c}\left|\left(p_e e^{i(\boldsymbol{\chi}\mathbf{r})}\right)_{ba}\right|^2 \overline{n}_\nu \qquad (8.14)$$
- Аналогично можно найти вероятность поглощения.
- Коэффициент пропорциональности в точности такой же, как и в случае испускания. Поэтому отношение обеих вероятностей равно
$$\frac{w_{rad}}{w_{abs}} = \frac{\overline{n}_\nu + 1}{\overline{n}_\nu} \quad (8.15)$$
- На том же основании, что и в случае излучения, можно опустить множитель $e^{i(\boldsymbol{\chi}\mathbf{r})}$ в формуле (8.14).
- Усредняя по всем ориентациям атома (т. е. по направлениям x, $\overline{\cos^2\Theta} = 1/3$) по отношению к падающему пучку и вводя вместо $\overline{n}_\nu$ первичную интенсивность $I_0(\nu)$ по формуле (8.13), найдем энергию, поглощенную за единицу времени:
$$S = \frac{4\pi^2}{3}\frac{e^2}{\hbar c}\nu\,|\mathbf{x}_{ba}|^2 I_0(\nu) \qquad (8.16)$$

9.1 Теория естественной ширины линии. Основные понятия

- При классическом рассмотрении процессов испускания и поглощения света линия, излученная осциллятором, не являлась бесконечно узкой.
- Она имела естественную ширину γ соответствующую распределению интенсивности

$$I(\nu) = I_0 \frac{\gamma}{2\pi} \frac{1}{(\nu - \nu_0)^2 + \gamma^2/4}, \qquad (9.1)$$

- где ν_0 — частота осциллятора. Своим происхождением эта естественная ширина обязана силе самодействие электрона.

9.2 Атом с двумя состояниями

- Рассмотрим случай, когда атом может находиться только в двух состояниях a, b $(E_b > E_a)$. Учтем лишь те состояния, в которые возможны прямые переходы из начального состояния (первое приближение по H).
- Предположим, что в момент $t = 0$ атом возбужден и световые кванты отсутствуют. Тогда можно ограничиться рассмотрением таких состояний, из которых атом перескакивает в низшее состояние, испуская один световой квант $\hbar\nu$ с частотой, примерно равной $E_b - E_a$.
- Обозначая амплитуды вероятности через b_{b0} и b_{a1_λ} найдем

$$i\hbar\dot{b}_{b0} = \sum_\lambda H_{b0|a1_\lambda} b_{a1_\lambda} e^{i(E_b-E_a-k_\lambda)t/\hbar}, \qquad (9.2а)$$

$$i\hbar\dot{b}_{a1_\lambda} = H_{a1_\lambda|b0}\, b_{b0}\, e^{i(E_a-E_b+k_\lambda)t/\hbar}, \qquad (9.2б)$$

- Начальными условиями будут

$$b_{b0}(0) = 1, \qquad b_{a1_\lambda}(0) = 0. \quad (9.3)$$

- Попытаемся решить уравнения (9.2), полагая

9.2 Атом с двумя состояниями

- $$b_{b0}(t) = e^{-\gamma t/2}\,, \qquad (9.4)$$
- т. е. предполагая, что вероятность нахождения атома в возбужденном состоянии убывает экспоненциально со временем жизни $1/\gamma$.
- Если подставить выражение (9.4) в (9.2б), то можно получить дифференциальное уравнение, решение которого можно подставить в уравнение (9.2а), и провести дополнительные вычисления, в результате которых можно получить действительную часть γ

$$\gamma = \frac{2\pi}{\hbar}\int \rho_k |H|^2 d\Omega = w_{ab} \quad (9.5)$$

- Согласно (8.4), γ как раз равна полной вероятности спонтанного излучения $b \rightarrow a$ за единицу времени.

$$w_{n|0} = \frac{2\pi}{\hbar}\rho_E |H|^2 \qquad (8.4)$$

9.2 Атом с двумя состояниями

- Распределение интенсивности излученной линии дается функцией вероятности конечного состояния b_{a1_λ}.
- По истечении промежутка времени $t \gg 1/\gamma$, когда атом скорее всего перейдет вниз, вероятность испускания кванта с энергией $\hbar\nu_\lambda$ будет:

$$\left|b_{a1_\lambda}(\infty)\right|^2 = \frac{|H|^2}{\hbar^2}\frac{1}{(\nu_\lambda - \nu_0)^2 + \gamma^2/4}, \qquad (9.6)$$

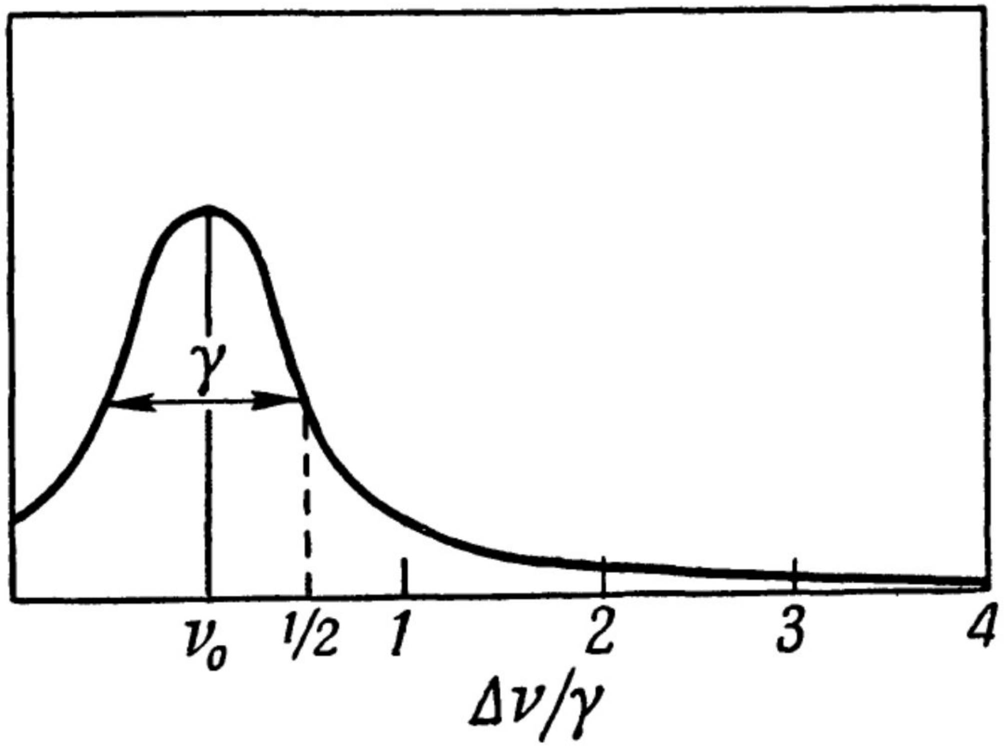
- или, интегрируя по всем направлениям распространения, согласно (9.5), получаем

$$I(\nu)d\nu = \hbar\nu\rho_k dk \int\left|b_{a1_\lambda}(\infty)\right|^2 d\Omega = \frac{\gamma}{2\pi}\frac{\hbar\nu d\nu}{(\nu - \nu_0)^2 + \gamma^2/4}. \qquad (9.7)$$

- Полная интенсивность есть $\hbar\nu = I_0$. Формула (9.7) тождественна классической, и γ означает вероятность перехода за единицу времени.

9.2 Атом с двумя состояниями

- Поэтому в квантовой теории спектральная линия имеет то же распределение интенсивности, что и в классической теории. Ширина линии в точке, где интенсивность достигает половины своего максимального значения, равна полной вероятности перехода за единицу времени. Максимум интенсивности падает на частоту ν_0, даваемую разностью энергий двух состояний атома.



9.2 Атом с двумя состояниями

- Связь между полушириной и вероятностью перехода можно получить из соотношения неопределенностей для энергии и времени:

$$\Delta E \Delta t = \hbar$$

- которое утверждает, что энергия системы известна лишь с точностью ΔE, если на ее измерение затрачено время Δt.
- В данном случае возбужденное состояние имеет время жизни $1/\gamma$ благодаря отличию от нуля вероятности радиационного перехода.
- Поэтому энергия возбужденного состояния определена лишь в пределах интервала $\Delta E = \hbar\gamma$, а это означает, что уровень энергии E_b имеет ширину $\Delta E_b \approx \hbar\gamma$.
- Тогда частота излученной линии будет иметь такую же ширину $\Delta\nu \sim \gamma$.

9.3 Несколько атомных состояний

- Случай, когда атом имеет несколько состояний $a, b, c, \ldots$, более сложен.
- Если обозначать атомные уровни в порядке возрастания их энергий через $a_1, a_2, \ldots$, то можно, согласно формуле (9.6), приписать каждому уровню a_i некоторую ширину, даваемую суммой вероятностей всех переходов из a_i на все низшие уровни

$$\frac{\Delta E_{a_i}}{\hbar} \equiv \gamma_i = \sum_{j<i} w_{a_j|a_i}, \qquad (9.8)$$

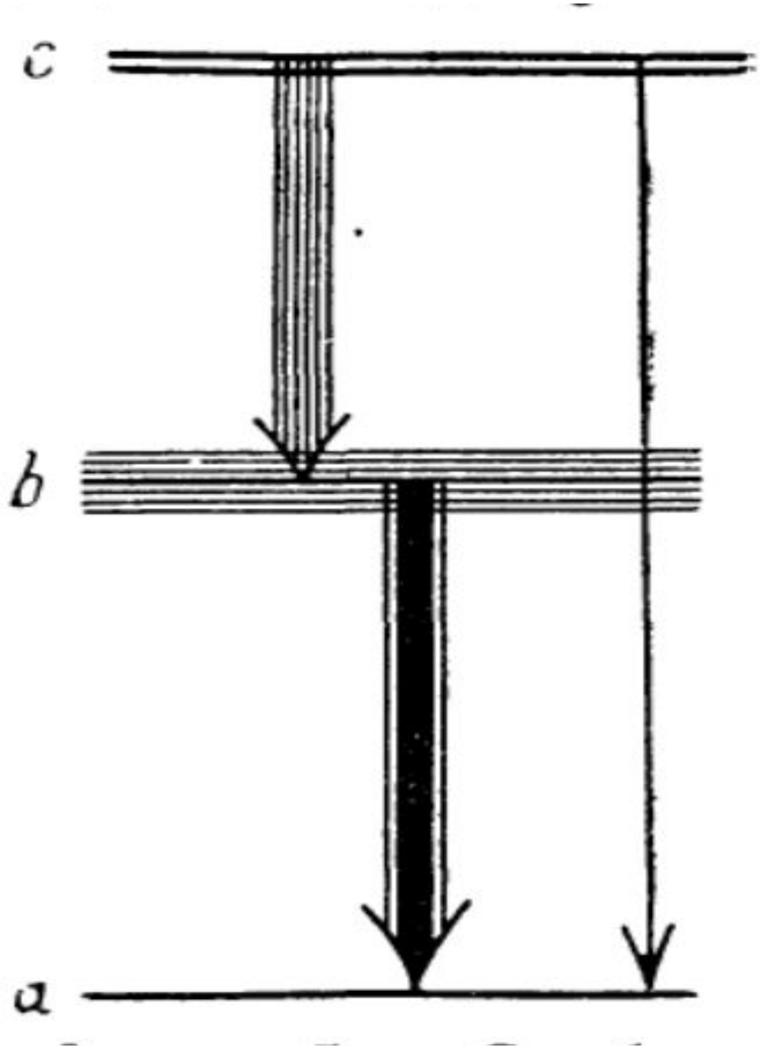
- где $w_{a_j|a_i}$ — вероятность перехода $a_i \to a_j$.
- Ширина некоторой линии $a_i \to a_k$, дается суммой ширин двух уровней a_i и a_k

$$\gamma_{ki} = \gamma_i + \gamma_k. \quad (9.9)$$

- Распределение интенсивности снова классическое с $\gamma = \gamma_{ki}$.

9.3 Несколько атомных состояний

- Однако, в квантовой теории может получиться, что даже слабая линия довольно широка.
- Рассмотрим, например, случай с тремя уровнями a, b, c,
- Вероятности всех переходов из высшего уровня c малы, а потому c — узкий уровень. Из b к основному уровню a (всегда резкому) ведет сильная линия, поэтому уровень b—широкий.
- Согласно (9.9), линия $c \to b$ должна также быть широкой, хотя вероятность перехода очень мала. Линия $c \to a$, с другой стороны, узкая, поскольку она соединяет два узких уровня.



9.4 Поглощение

- Форма линии поглощения должна совпадать с формой линии испускания, если падающий пучок света имеет постоянную интенсивность в области ширины линии. Это следует из общих соображений о равновесии (закон Кирхгофа).
- Пусть $I_0(\nu) = I_0(\nu_0)d\nu$ обозначает интенсивность первичного пучка.
- Тогда за единицу времени в переходе $a \to b$ будет поглощена энергия из интервала от ν до $\nu + d\nu$, равная

$$S(\nu)d\nu = w_{ab}\frac{\pi^2 c^2}{\nu_0^2}\frac{\gamma}{2\pi}\frac{I_0(\nu_0)d\nu}{(\nu-\nu_0)^2+\gamma^2/4} \quad (\gamma = \gamma_a + \gamma_b\ ) \quad (9.10)$$

- где w_{ab} — вероятность спонтанного излучения при переходе $b \to a$.

9.4 Поглощение

- Рассматривая слой толщины Δx, содержащий N атомов на $1\ \text{см}^2$ в поглощающем состоянии a, можно определить коэффициент поглощения на 1 см первичного светового пучка $\tau(\nu)$:

$$\tau(\nu) = \frac{S(\nu)}{I_0(\nu_0)} N = N w_{ab} \frac{\pi^2 c^2}{\nu_0^2} \frac{\gamma}{2\pi} \frac{1}{(\nu - \nu_0)^2 + \gamma^2/4} \quad (9.11)$$

- Если частоты сильно удалены от максимума, то $(\nu - \nu_0)^2 \gg \gamma^2$ и коэффициент поглощения убывает как квадрат разности частот $\Delta\nu = \nu - \nu_0$. (Эта разность связана с длиной волны соотношением $2\pi\Delta\lambda = 2\pi c \Delta\nu/\nu^2$).
- В этом случае отношение поглощенной интенсивности к первичной определяется соотношением

$$\tau(\lambda)\Delta x = N \Delta x w_{ab} \gamma \frac{\pi \lambda^6}{2c^2 \Delta\lambda^2}. \qquad (9.12)$$

- (Здесь длина волны равна $2\pi\lambda$.)

9.5 Другие причины уширения линий

- Помимо затухания, связанного с испусканием излучения, имеется несколько механизмов, которые приводят к уширению линий.
- а) В газе при температуре T атомы (массы M) движутся со скоростями, распределенными по закону Максвелла: $e^{-v_x^2 M/2kT}$.
- Если наблюдается свет, испущенный в x-направлении, то линия будет смещена вследствие эффекта Допплера на величину:

$$\Delta\nu = \frac{\nu_0 v_x}{c}. \qquad (9.13)$$

- Усредняя, получаем в силу этого широкую линию с распределением интенсивности

$$I(\nu) = const\ d\nu e^{-Mc^2\Delta\nu^2/2\nu_0^2 kT} \qquad (9.14)$$

- и с шириной на половине максимума

$$\delta = \nu_0\sqrt{\frac{2kT}{Mc^2}\ln 2}\,. \qquad (9.15)$$

9.5 Другие причины уширения линий

•

$$\delta = \nu_0 \sqrt{\frac{2kT}{Mc^2} \ln 2}\,. \qquad (9.15)$$

- Допплеровская ширина δ намного больше естественной ширины γ.
- Однако распределение интенсивности экспоненциальное, а потому быстро убывающее с ростом расстояния от максимума $\Delta\nu$ в отличие от естественной ширины, которая имеет очень длинный хвост, убывающий лишь как $1/\Delta\nu^2$.
- Поэтому интенсивность, наблюдаемая на большом расстоянии от максимума (т. е. если $\Delta\nu \gg \delta$), соответствует естественной ширине.

9.5 Другие причины уширения линий

-

- б) В газе конечной плотности возбужденный атом испытывает столкновения с соседними атомами. Эти столкновения могут привести к переходу на основной уровень.
- Действие таких столкновений на ширину линии можно описать следующим образом:
- если число эффективных столкновений за 1 с есть Γ, то время жизни возбужденного состояния b укорачивается. Общее число переходов за 1 с (радиационные переходы + переходы, обусловленные столкновениями) равно теперь $\gamma + \Gamma$. Поэтому ширина уровня b будет равна

$$\frac{\Delta E_b}{\hbar} = \gamma + \Gamma \qquad (9.16)$$

- Испущенная линия имеет такое же распределение интенсивности, как и естественная линия (9.10), с той лишь разницей, что γ теперь следует заменить на $\gamma + \Gamma$.
- При очень малых плотностях эффект уширения, вызванный столкновениями,

Заключение

- Изложенные приложения теории возмущения к различным процессам поглощения и излучения основаны на разложении в ряд по степеням электрического заряда e, играющего роль константы связи между заряженными частицами и полем излучения.
- Рассмотрены члены первого порядка по e. Такой подход позволил получить соответствие между классической и квантовой теорией. Учет членов разложения более высоких порядков приводит к возникновению радиационных поправок.