

ISSN 2223-4586

# НАНО ИНЖЕНЕРИЯ

2(20)

2013

ЕЖЕМЕСЯЧНЫЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ И ПРОИЗВОДСТВЕННЫЙ ЖУРНАЛ



В.К. Неволин

(Национальный исследовательский университет МИЭТ, г. Москва)  
E-mail: vkn@miee.ru**АТОМ ВОДОРОДА: ЧТО НОВОГО? ЧАСТЬ II\***

*Новые технологии всегда способствовали развитию науки. Нанотехнологии не являются исключением. Это научно-прикладное направление, выявляющее и использующее в интересах людей фундаментальные свойства материи в нанометровом масштабе. С развитием нанотехнологий меняются представления об окружающих объектах наномира. В связи с этим вполне естественно обратиться к истокам квантовой механики на примере атома водорода.*

**Ключевые слова:** квантовые уравнения движения, атом водорода, пространственное структурирование плотности вероятности, квадрупольные электрические моменты, правила отбора для дипольного излучения.

*New technologies have always contributed to the development of science. Nanotechnology is no exception. This applied science direction detects and uses the fundamental properties of matter at the nanometer scale for the benefit of the people. With the development of nanotechnology ideas about the surrounding objects of the nanoworld are changing. In this regard, it is natural to turn to the origins of quantum mechanics on the example of a hydrogen atom.*

**Keywords:** quantum equations of motion, a hydrogen atom, a new spatial structuring of the probability density, electric quadrupole moments, the selection rules for dipole radiation.

В первой части статьи [1] было показано, что плотность вероятности нахождения электрона, двигающегося вокруг ядра, в отличие от традиционных представлений структурирована в большей мере, чем это было известно ранее, а это должно приводить к более детальным представлениям, в частности, уточнению значений квадрупольного момента атома. Отличие электрических квадрупольных моментов от известных ранее должно приводить к наблюдению более существенной анизотропии квадрупольного излучения или к большим флуктуациям интенсивности излучения разреженного газа возбужденных атомов водорода в заданной точке и к большей средней интенсивности излучения.

Для доказательства такого утверждения целесообразно решить задачу об атоме водорода в представлении плотности вероятности, непосредственно описывающую ее распределение во всех возможных квантовых состояниях [2—4], что и было сделано. Задачу можно решать и в представлении Шредингера [5]. Единственное отличие от стандартного решения этого уравнения методом разделения пере-

менных  $\Psi = \Psi_r(r)\Psi_\theta(\theta)\Psi_\phi(\phi)$  должно заключаться в том, что решение для  $\Psi_\phi$  нужно записывать в полном виде:

$$\Psi_\phi = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}(e^{im\phi} + e^{-im\phi}), \quad (1)$$

поскольку нет предпочтительного направления для вращательных состояний.

В возбужденных состояниях структурирование плотности вероятности по углу  $\phi$  должно приводить к различию квадрупольных моментов, вычисленных с помощью прежних волновых функций для атома водорода и новых выражений для плотности вероятности. Квадрупольные моменты будем вычислять по формуле [6]:

$$Q_{ik}^{nlm} = e \int \rho_{nlm}(r, \theta, \phi)(3x_i x_k - \delta_{ik} r^2) dr d\theta d\phi.$$

Конкретные вычисления показывают, что в принятой системе координат недиагональные квадрупольные элементы во всех случаях равны нулю. Диагональные элементы по оси  $z$  совпадают  $Q_{zz}^{nlm} = \tilde{Q}_{zz}^{nlm}$ . Здесь  $Q_{zz}^{nlm}$  вычислен с помощью волновых функций атома водорода,

\* Начало см. № 12, 2012 г.

$\tilde{Q}_{zz}^{nlm}$  вычислен в представлении плотности вероятности, когда имеет место структурирование по углу  $\phi$ . Квадрупольные моменты по осям  $x, y$  совпадают  $Q_{xx}^{nlm} = \tilde{Q}_{xx}^{nlm}$  и  $Q_{yy}^{nlm} = \tilde{Q}_{yy}^{nlm}$  при  $m = 0$  и  $m > 1$ . Квадрупольные моменты при  $m = 1$  различаются:

$$\begin{aligned}\tilde{Q}_{xx}^{n'l1} &= Q_{xx}^{n'l1}/2 - Q_r^{nl}/8; \\ \tilde{Q}_{yy}^{n'l1} &= 3Q_{yy}^{n'l1} + 3Q_r^{nl}/4,\end{aligned}\quad (2)$$

где  $Q_r^{nl} = e \int_0^\infty R_{nl}^2(r) r^4 dr$ .

Интеграл имеет смысл среднего квадрата радиуса распределения электронной плотности в атоме. Различие квадрупольных моментов при  $m = 1$  соответствует "двулистному" распределению плотности вероятности (см. рис. 1 [1]), когда имеет место ось симметрии второго порядка. В этом случае поперечные составляющие не равны между собой и  $\tilde{Q}_{xx}^{n'l1}$  и  $\tilde{Q}_{yy}^{n'l1}$  существенно отличаются от  $Q_{xx}^{n'l1} = Q_{yy}^{n'l1}$ . Различие электрических моментов должно иметь место и для мультиполей более высокого порядка.

Разница в величинах квадрупольных моментов при  $m = 1$  может проявляться при исследовании квадрупольного излучения атома водорода, водородоподобных ионов и водородоподобных атомов в соответствующих квантовых состояниях. Интенсивность излучения линий равна:

$$I(A, B) = N(a) 2\pi \hbar v A_g;$$

$$A_g = \frac{16\pi^5 v^5}{15\hbar c^5} \sum_{a, b} | \langle a | e(3x_p x_k - \delta_{ik} r^2) | b \rangle |^2,$$

где  $A$  и  $B$  — состояния высшего и низшего энергетических уровней, между которыми происходит переход;

$N(a)$  — количество атомов, находящихся в данный момент в начальном состоянии  $a$ ;

$b$  — конечное состояние;

$v$  — частота линии;

$A_g$  — вероятность электрического квадрупольного перехода;

$\sum_{a, b}$  — обозначает, что интенсивность линии ( $A, B$ ) равняется сумме интенсивностей ее компонент.

Составляющую волновых функций по углу  $\phi$  нужно брать в виде (1). Квадрупольное излучение может проявляться, например, при исследовании после свечения метастабильных уровней [7].

Структурирование электронной плотности вероятности для возбужденных атомов водорода должно проявляться и для дипольных переходов. Правила отбора будем вычислять для оптического электрона и только для движения по углу  $\phi$ , поскольку остальные составляющие матричных элементов перехода совпадают. Вычисления проводим согласно [5]:

$$D_{n'l'm', nlm}^z = \frac{e z_{n'l'm', nlm}}{\pi} \int_0^{2\pi} \cos(m\phi) \cos(m'\phi) d\phi =$$

$$= \tilde{D}_{n'l'm', nlm}^z \delta_{m, \pm m'}; \quad (3)$$

$$D_{n'l'm', nlm}^x =$$

$$= \frac{e x_{n'l'm', nlm}}{\pi} \int_0^{2\pi} \sin\phi \cos(m\phi) \cos(m'\phi) d\phi = 0; \quad (4)$$

$$D_{n'l'm', nlm}^y =$$

$$= \frac{e y_{n'l'm', nlm}}{\pi} \int_0^{2\pi} \cos\phi \cos(m'\phi) \cos(m\phi) d\phi =$$

$$= \frac{\tilde{D}_{n'l'm', nlm}^y}{2} (\delta_{m, m' \pm 1} + \delta_{m, -m' \pm 1}). \quad (5)$$

В соответствии с формулой (3) матричный элемент  $D_{n'l'm', nlm}^z$ , отличный от нуля для переходов  $m \rightarrow \pm m'$ , является вырожденным по знаку магнитного числа  $m$  для угловой составляющей волновой функции (1). В отличие от [5], где одна из поперечных компонент, например,  $D_{n'l'm', nlm}^x$  является мнимой величиной, в нашем случае  $D_{n'l'm', nlm}^x = 0$ . С мнимым матрич-

$\tilde{Q}_{zz}^{nlm}$  вычислен в представлении плотности вероятности, когда имеет место структурирование по углу  $\phi$ . Квадрупольные моменты по осям  $x, y$  совпадают  $Q_{xx}^{nlm} = \tilde{Q}_{xx}^{nlm}$  и  $Q_{yy}^{nlm} = \tilde{Q}_{yy}^{nlm}$  при  $m = 0$  и  $m > 1$ . Квадрупольные моменты при  $m = 1$  различаются:

$$\begin{aligned}\tilde{Q}_{xx}^{n11} &= Q_{xx}^{n11}/2 - Q_r^{nl}/8; \\ \tilde{Q}_{yy}^{n11} &= 3Q_{yy}^{n11} + 3Q_r^{nl}/4,\end{aligned}\quad (2)$$

где  $Q_r^{nl} = e \int_0^\infty R_{nl}^2(r) r^4 dr$ .

Интеграл имеет смысл среднего квадрата радиуса распределения электронной плотности в атоме. Различие квадрупольных моментов при  $m = 1$  соответствует "двулистному" распределению плотности вероятности (см. рис. 1 [1]), когда имеет место ось симметрии второго порядка. В этом случае поперечные составляющие не равны между собой и  $\tilde{Q}_{xx}^{n11}$  и  $\tilde{Q}_{yy}^{n11}$  существенно отличаются от  $Q_{xx}^{n11} = Q_{yy}^{n11}$ . Различие электрических моментов должно иметь место и для мультиполей более высокого порядка.

Разница в величинах квадрупольных моментов при  $m = 1$  может проявляться при исследовании квадрупольного излучения атома водорода, водородоподобных ионов и водородоподобных атомов в соответствующих квантовых состояниях. Интенсивность излучения линий равна:

$$I(A, B) = N(a) 2\pi \hbar v A_g;$$

$$A_g = \frac{16\pi^5 v^5}{15\hbar c^5} \sum_{a, b} | \langle a | e(3x_i x_k - \delta_{ik} r^2) | b \rangle |^2,$$

где  $A$  и  $B$  — состояния высшего и низшего энергетических уровней, между которыми происходит переход;

$N(a)$  — количество атомов, находящихся в данный момент в начальном состоянии  $a$ ;

$b$  — конечное состояние;

$v$  — частота линии;

$A_g$  — вероятность электрического квадрупольного перехода;

$\sum_{a, b}$  — обозначает, что интенсивность линии ( $A, B$ ) равняется сумме интенсивностей ее компонент.

Составляющую волновых функций по углу  $\phi$  нужно брать в виде (1). Квадрупольное излучение может проявляться, например, при исследовании после свечения метастабильных уровней [7].

Структурирование электронной плотности вероятности для возбужденных атомов водорода должно проявляться и для дипольных переходов. Правила отбора будем вычислять для оптического электрона и только для движения по углу  $\phi$ , поскольку остальные составляющие матричных элементов перехода совпадают. Вычисления проводим согласно [5]:

$$\begin{aligned}D_{n'l'm', nlm}^z &= \frac{e z_{n'l'm', nlm}}{\pi} \int_0^{2\pi} \cos(m\phi) \cos(m'\phi) d\phi = \\ &= \tilde{D}_{n'l'm', nlm}^z \delta_{m, \pm m'};\end{aligned}\quad (3)$$

$$\begin{aligned}D_{n'l'm', nlm}^x &= \\ &= \frac{e x_{n'l'm', nlm}}{\pi} \int_0^{2\pi} \sin\phi \cos(m\phi) \cos(m'\phi) d\phi = 0;\end{aligned}\quad (4)$$

$$\begin{aligned}D_{n'l'm', nlm}^y &= \\ &= \frac{e y_{n'l'm', nlm}}{\pi} \int_0^{2\pi} \cos\phi \cos(m'\phi) \cos(m\phi) d\phi = \\ &= \frac{\tilde{D}_{n'l'm', nlm}^y}{2} (\delta_{m, m' \pm 1} + \delta_{m, -m' \pm 1}).\end{aligned}\quad (5)$$

В соответствии с формулой (3) матричный элемент  $D_{n'l'm', nlm}^z$ , отличный от нуля для переходов  $m \rightarrow \pm m'$ , является вырожденным по знаку магнитного числа  $m$  для угловой составляющей волновой функции (1). В отличие от [5], где одна из поперечных компонент, например,  $D_{n'l'm', nlm}^x$  является мнимой величиной, в нашем случае  $D_{n'l'm', nlm}^x = 0$ . С мнимым матрич-

ным элементом связываются переходы со смещенными частотами и с круговой поляризацией. Для  $D_{n'l'm',nlm}^y$  возможны два дипольных перехода с изменением магнитного числа на единицу, и два связанных с изменением знака магнитного числа  $m$ , которые, однако, являются вырожденными.

Применим полученные матричные элементы и правила отбора для простого эффекта Зеемана [5]. Известно, что квантовые уровни атомов расщепляются в магнитном поле. Пусть магнитное поле направлено вдоль оси  $z$ , а электрон обладает спином и соответствующим магнитным моментом. Тогда имеется выделенное направление для вращательных состояний. Для излучательных переходов с матричными элементами  $\tilde{D}_{n'l'm',nlm}^z$  в силу законов сохранения энергии возможны только переходы без изменения знака магнитного числа  $m \rightarrow m'$ . Изучение будет распространяться поперек магнитного поля, и плоскость линейной поляризации несмещенной частоты будет проходить через направление магнитного поля. Для излучательных переходов с матричными элементами

$D_{n'l'm',nlm}^y$  возможны четыре типа переходов со смещенной частотой: два линейно поляризованных  $m \rightarrow m' \pm 1$  с плоскостью поляризации

перпендикулярной направлению магнитного поля и два вращательных перехода со смещенной частотой и изменением знака  $m \rightarrow -m' \pm 1$  и направлением излучения вдоль оси  $z$ . Получается пять возможных пиков излучения: два пика со смещенной частотой вдоль направления магнитного поля и три пика излучения поперек магнитного поля с линейной поляризацией (зеемановский триплет).

Таким образом, в магнитном поле структурирование электронной плотности вероятности для вращательных состояний в возбужденных атомах водорода не изменяет правила отбора для дипольного излучения и уточняет величины матричных элементов.

#### Библиографический список

1. Неволин В.К. Атом водорода: что нового? // Наноинженерия. 2012. № 12. С. 44–46.
2. Ghosh S.K., Deb B.M. Densities, Density-Functionals and Electron Fluids // Physics Reports (Review Section of Physics Letters). 1982. V. 92. № 1. Р. 1–44.
3. Алексеев Б.В., Абакумов А.И. Об одном подходе к решению уравнения Шредингера // Доклады Академии наук. 1982. Т. 262. С. 1100–1102.
4. Неволин В.К. Квантовый транспорт в устройствах электроники. М.: Техносфера, 2012. 87 с.
5. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. М.: Наука, 1976. С. 384.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. М.: ГизФМЛ, 1960. 400 с.
7. Дебров В.Л., Серов В.В., Тепер Н.И. Исследование излучения атома водорода под действием импульса титан-сапфировового лазера // Компьютерная оптика. 2010. Т. 34. № 2. С. 156–161.

ООО «Издательство Машиностроение», 107076, Москва, Строгинский пер., 4  
Учредитель ООО «Издательство Машиностроение». E-mail: [nanoeng@mashin.ru](mailto:nanoeng@mashin.ru)  
Телефон редакции журнала: (499) 269-66-61. <http://www.mashin.ru>

Дизайнер Н.А. Свиридова. Технический редактор Е.В. Конова. Корректор Е.В. Комиссарова.

Сдано в набор 03.12.2012. Подписано в печать 22.01.2013.

Формат 60 × 88 1/8. Усл. печ. л. 5,88. Цена свободная.

Отпечатано в ООО «Белый ветер», 115407, Москва, Нагатинская наб., д. 54, пом. 4