

درس بیست و سوم : گسیل و جذب تابش در اتم ها

۱ مقدمه

در این درس می خواهیم مسئله تابش از اتم ها را مطالعه کنیم. در مدل اولیه بوهر فرض اصلی آن است که الکترون وقتی در یک تراز انرژی است و به دوره‌سته می چرخد، برخلاف الکترومغناطیس کلاسیک هیچ تابشی نمی کند و تنها موقعی که الکترون از یک تراز به یک تراز دیگر سقوط می کند فوتونی با انرژی مشخص که برابر با تفاضل انرژی حالت اولیه و حالت نهایی ساطع می کند. در مکانیک جدید چگونه باید پدیده تابش را فهمید؟ یک الکترون وقتی که در یک تراز انرژی است هیچ دلیلی برای سقوط به تراز پایین تر ندارد، زیرا تراز انرژی اولیه یک ویژه حالت هامیلتونی است و الکترون می تواند تا ابد در آن ویژه حالت باقی بماند. حقیقت آن است که یک تراز انرژی ویژه حالت هامیلتونی اتم است و نه ویژه حالت هامیلتونی اتم و میدان کوانتومی الکترومغناطیسی. به همین دلیل عمر این حالت کوتاه است و اتم و میدان در این حالت باقی نخواهند ماند و به حالت دیگری که تشکیل شده از یک تراز پایین تر اتمی و یک فوتون است گذار می کنند. به اصطلاح اتم از خود یک فوتون گسیل می کند. در این درس می خواهیم از دیدگاه مکانیک کوانتومی مسئله تابش را مطالعه کنیم. مطالعه کامل و دقیق این پدیده و به طور کلی برهم کنش نور و ماده در الکترودینامیک کوانتومی میسر خواهد شد. الکترودینامیک کوانتومی حاصل تلفیق گریزنایذیر مکانیک کوانتومی و نسبیت خاص است و وقتی که این تلفیق را انجام می دهیم ناچار می شویم که ذرات مادی را نیز همچون فوتون ها به عنوان حالت ها یا کوانتاهایی از میدان های کوانتومی در نظر بگیریم. در این درس نمی توانیم این مطالعه را انجام دهیم و ناچاریم که با کمی تسامح و قبول مطالب نه چندان دقیق و ترکیب مفاهیم مختلف از الکترومغناطیس کلاسیک و مکانیک کوانتومی تابش از اتم ها را مطالعه کنیم. این مطالعه را در سه سطح انجام می دهیم.

۲ برخورد نزدیک از نوع اول

در این برخورد نور را به صورت یک موج الکترومغناطیسی کلاسیک و اتم را به صورت یک ذره کوانتومی در نظر می گیریم. ولی تنظیم هایی انجام می دهیم که نتایج نهایی با آنچه که از مطالعه کامل و دقیق بدست می آید، مطابقت کند. بنابراین پتانسیل برهم کنش بین اتم و میدان الکترومغناطیسی را به صورت

$$V = \frac{e}{mc} \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}, \quad (1)$$

می نویسیم که در آن

$$\mathbf{A} = A_0 \mathbf{P} \cdot \mathbf{e} (e^{i\omega t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + e^{-i\omega t + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}), \quad (2)$$

پتانسیل برداری است. بنابراین V یک پتانسیل پریودیگ به صورت

$$V = V_0 e^{i\omega t} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + V_0^\dagger e^{-i\omega t} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (3)$$

است که در آن

$$\begin{aligned} V_0 &= \frac{e}{mc} \mathbf{P} \cdot \mathbf{e} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ V_0^\dagger &= \frac{e}{mc} \mathbf{P} \cdot \mathbf{e} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (4)$$

سپس از این پتانسیل ها در قاعده های طلایی فرمی استفاده کنیم. تنها به چند نکته باید دقت کنیم:

- ۱ - مطابق با آنچه که در اختلال توسط پتانسیل های پریودیگ دیدیم، برای گسیل تابش از ضریب جمله $e^{-i\omega t}$ یعنی V_0 و برای جذب تابش از جمله متناسب با $e^{i\omega t}$ یعنی V_0^\dagger استفاده می کنیم.
- ۲ - تعبیری که از k و ω می کنیم آن است که اینها به ترتیب بردار موج و فرکانس فوتون تابش یا جذب شده است.
- ۳ - برای آنکه نتایج بدست آمده با نتایج دقیق ناشی از الکترو دینامیک کوانتومی مطابقت کند، می بایست مقدار A_0 را تعیین کنیم. برای این کار میدان کلاسیک A را به صورت 2 در نظر می گیریم و انرژی الکترومغناطیسی ناشی از چنین میدانی را برابر با $N\hbar\omega$ قرار می دهیم که در آن N تعداد فوتون های درون محیط است. می دانیم که انرژی الکترومغناطیسی برابر است با:

$$U = \frac{1}{8\pi} \int dx (E^2 + B^2) = \frac{1}{8\pi} \int dx \left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A^2}{\partial t^2} + (\nabla \times A)^2 \right] \quad (5)$$

با قراردادن 2 در این رابطه و محاسبه انتگرال ها و مساوی قرار دادن حاصل با $N\hbar\omega$ مقدار A_0 بدست می آید:

$$A_0 = \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar N}{\omega V}}. \quad (6)$$

- ۴ - در این رابطه V حجم محیط و N تعداد فوتون های درون آن است. برای اتمی که تابش می کند محیط موثر، محیطی که اتم با میدان برهم کنش می کند، آنقدر کوچک است که فوتون های گسیل شده بلافاصله آن را ترک می کنند. بنابراین N را چه برای تابش و چه برای جذب فوتون برابر با 1 می گیریم. بطور خلاصه قواعد فرمی برای تابش و جذب به شکل زیر هستند:

$$\Gamma_{i,f}^{emission} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{m^2 c^2} \frac{2\pi \hbar c^2}{\omega V} |\langle \psi_f | \mathbf{e} \cdot \mathbf{P} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega), \quad (7)$$

و

$$\Gamma_{i,f}^{absorption} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{m^2 c^2} \frac{2\pi \hbar c^2}{\omega V} |\langle \psi_f | \mathbf{e} \cdot \mathbf{P} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (8)$$

که در آن $|\psi_i\rangle$ و $|\psi_f\rangle$ حالت های ابتدایی و نهایی اتم هستند.

۳ برخورد نزدیک از نوع دوم

در این برخورد میدان الکترومغناطیسی را به صورت میدان کوانتومی و ماده یعنی اتم را به صورت یک ذره کوانتومی در نظر می گیریم. در درس گذشته با مفهوم فوتون آشنا شدیم. اینک می خواهیم به بررسی مسئله تابش از یک اتم بپردازیم. فرض می کنیم که یک اتم در یکی از حالات برانگیخته اش قرار دارد. می خواهیم بدانیم که این اتم با چه احتمالی به یک تراز پایین سقوط کرده و یک فوتون تابش می کند. هامیلتونی برهم کنش میدان الکترومغناطیس و ماده عبارت است از:

$$H = H_0 + \frac{e}{mc} \mathbf{P} \cdot A = H_{atom} + H_{field} + \frac{e}{mc} \mathbf{P} \cdot A \quad (9)$$

در این رابطه H_0 مجموع هامیلتونی ماده بعلاوه هامیلتونی میدان الکترومغناطیس است و بقیه عبارت هامیلتونی برهم کنش ماده و الکترومغناطیس است. در این رابطه A پتانسیل برداری میدان الکترومغناطیسی است که در درس قبلی دیدیم به صورت بسطی از عملگرهای خلق و فنا ی فوتون ها قابل نوشتن است، یعنی

$$\hat{A}(x, t) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left(\frac{2\pi c^2 \hbar}{V \omega} \right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{e}_\lambda \left(a_{\lambda, \mathbf{k}} e^{i\omega t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + a_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger e^{-i\omega t + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right). \quad (10)$$

برای گسیل تابش فرض می کنیم که حالت اولیه حالتی است که اتم در یک ویژه حالت H_{atom} مثل ψ_i است و میدان نیز در حالت خلا است. بنابراین حالت اولیه برابر است با:

$$|\Phi_i\rangle = |\psi_i\rangle \otimes |0\rangle. \quad (11)$$

اگر جمله برهم کنش میدان و ماده نبود این حالت یک ویژه حالت H_0 یعنی هامیلتونی اتم و میدان بود و پایدار می بود. جمله برهم کنش باعث می شود که این حالت به حالت های دیگر گذار کند. می خواهیم در این بخش احتمال گذار این حالت را به حالت زیر حساب کنیم:

$$|\Phi_f\rangle = |\psi_f\rangle \otimes |k, \lambda\rangle, \quad (12)$$

یعنی حالتی که اتم در یک ویژه حالت دیگر از H_{atom} قرار دارد و میدان نیز دارای یک فوتون با مشخصات (k, λ) شده است. مطابق با نظریه اختلال در رتبه دامنه این گذار برابر است با:

$$M_{i \rightarrow f} = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{\frac{i}{\hbar}(\tilde{E}_f - \tilde{E}_i)t'} \langle \Phi_f | V(t') | \Phi_i \rangle. \quad (13)$$

در این رابطه \tilde{E}_f و \tilde{E}_i انرژی های اولیه و نهایی اتم و میدان هستند. بنابراین اگر انرژی حالت های اولیه و نهایی اتم را با E_f و E_i نشان دهیم داریم

$$\tilde{E}_i = E_i, \quad \tilde{E}_f = E_f + \hbar\omega. \quad (14)$$

که در آن $\omega = \frac{k}{m}$. حال به عنصر ماتریسی دقت می کنیم. از آنجا که \mathbf{A} روی حالت های میدان و \mathbf{P} فقط روی حالت های اتمی اثر می کند، داریم

$$\langle \Phi_f | V(t') | \Phi_i \rangle = \langle \psi_f | \otimes \langle \mathbf{k}, \lambda | \frac{e}{mc} \mathbf{P} \cdot \mathbf{A} | \psi_i \rangle \otimes | 0 \rangle \quad (15)$$

باتوجه به رابطه 10 دیده می شود که

$$\langle k, \lambda | \mathbf{A} | 0 \rangle = \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega V}} e_{\lambda} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (16)$$

در این جا خواننده هشیار ممکن است اعتراض کند که چرا ما از نوشتن فاکتور $e^{-i\omega t}$ در رابطه بالا صرف نظر کرده ایم. دلیل اش این است که رابطه 10 در تصویر هایزبرگ نوشته شده است و حال آنکه $V(t)$ مطابق با درس های گذشته می بایست در تصویر شرودینگر نوشته شود. به همین دلیل فاکتور تحول زمانی را از آن بیرون کشیده ایم. این فاکتور زمانی واقعاً همانی است که تصویر شرودینگر و هایزبرگ را به هم مرتبط می کند. بنابراین احتمال گذار برابر خواهد شد با:

$$M_{i \rightarrow f} = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i - \hbar\omega)t'} \langle \psi_f | \frac{e}{mc} \mathbf{P} \cdot \mathbf{e}_{\lambda} A_0 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | \psi_i \rangle, \quad (17)$$

$$A_0 = \left(\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega V} \right)^{\frac{1}{2}} \text{ که در آن}$$

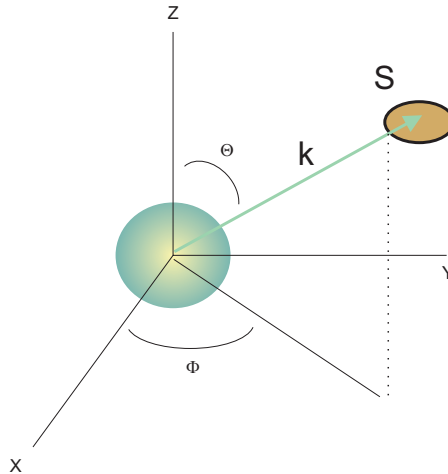
بنابراین نرخ گذار برابر خواهد بود با:

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | \frac{e}{mc} \mathbf{P} \cdot \mathbf{e}_{\lambda} A_0 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) \quad (18)$$

این عبارت نرخ گذار از حالت اولیه $|\Phi_i\rangle$ به حالت نهایی $|\Phi_f\rangle$ است. حالت نهایی شامل حالت اتمی $|\psi_f\rangle$ و حالت فوتون است که با تکانه و قطبش آن معین می شود. خواننده می تواند با تکرار استدلال بالا نشان دهد که برای جذب تابش نیز به رابطه مشابهی می رسیم که در آن \mathbf{k} و ω به ترتیب با $-\mathbf{k}$ و $-\omega$ عوض شده اند.

۴ برخورد نزدیک از نوع سوم

در این برخورد که کامل ترین و دقیق ترین نحوه برای بررسی برهم کنش نور و ماده است هم فوتون ها و هم الکترون ها به صورت کوانتاهای میدان های کوانتومی در نظر گرفته می شوند. نظریه میدان کوانتومی یا الکترو دینامیک کوانتومی چارچوبی برای مطالعه برهم کنش میدان های کوانتومی یا کوانتوم های آن هاست. این نوع مطالعه از چارچوب در نظر گرفته شده برای این درس خارج است. در درس آینده که اختیاری است اصول مقدماتی کوانتوم میدان الکترومغناطیسی را توضیح می دهیم. ولی فعلاً



شکل ۱: فوتونی که از اتم تابش می شود می تواند انرژی معین (به اندازه اختلاف انرژی دوتران اتمی) داشته باشد ولی تکانه آن می تواند جهت های گوناگون داشته باشد.

می بایست به رابطه ی 18 بازگردیم و محاسبه تابش را از آنجا دنبال کنیم.

۵ جمع زدن روی حالت های نهایی فوتون ها

حتی اگر حالت نهایی اتم یک حالت منفرد و گسسته باشد، حالت نهایی فوتون پیوستاری است که با جهات ممکن فوتون مشخص می شود. از آنجا که هرگز نمی توانیم تکانه یک فوتون را بطور دقیق معین کنیم می بایست نرخ گذار به گروهی از حالات نزدیک به هم را بدست آوریم. نرخ گذار به حالت های نهایی نزدیک به هم که تشکیل شده از حالت اتمی ψ_f و فوتون هایی که تکانه آنها در یک بازه معین \mathcal{F} قرار دارند را با $R_{i \rightarrow f}$ نشان می دهیم. (شکل ۱).

تعداد این حالت ها چند تاست؟ برای شمارش این حالت ها از این نکته استفاده می کنیم که تکانه های k_x ، k_y و k_z در شرط زیر صدق می کنند:

$$k_x = \frac{2\pi}{L}n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L}n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L}n_z, \quad (19)$$

که به موجب آن تعداد حالت های در بازه با تکانه d^3k برابر خواهد بود با

$$\Delta n = \frac{L^3}{(2\pi)^3} d^3k \quad (20)$$

در نتیجه خواهیم داشت

$$R_{i \rightarrow S} = \sum_{n \in S} \Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_S k^2 dk d\Omega \Gamma_{i \rightarrow f}$$

$$= \frac{V}{(2\pi)^3} \int_S \frac{\omega^2 d\omega}{c^2} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | \frac{e}{mc} \mathbf{P} \cdot \mathbf{e}_\lambda A_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) \quad (21)$$

انتگرال روی ω را محاسبه می کنیم که در نتیجه آن می بایست در عبارت زیر انتگرال همه ω ها را با $\omega_{fi} := \frac{E_i - E_f}{\hbar}$ عوض کنیم. در نتیجه بدست می آوریم:

$$R_{i \rightarrow S} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{\omega_{fi}^2}{c^3} \frac{2\pi}{\hbar} A_0^2 \frac{e^2}{m^2 c^2} \int_S d\Omega |\langle \psi_f | \mathbf{P} \cdot \mathbf{e}_\lambda e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \psi_i \rangle|^2. \quad (22)$$

باجایگزینی $A_0 = \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega V}}$ و ساده کردن بدست می آوریم:

$$R_{i \rightarrow S} = \frac{\alpha}{2\pi} \omega_{fi} \int d\Omega |\langle \psi_f | \mathbf{e} \cdot \frac{\mathbf{P}}{mc} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \psi_i \rangle|^2 \quad (23)$$

که در آن α ثابت ساختار ریز است.

۶ تابش دو قطبی و قواعد انتخاب

حال می بایست عنصر ماتریسی را محاسبه کنیم. نخست تخمینی از عنصر ماتریسی بدست می آوریم. داریم

$$\epsilon \cdot \mathbf{p} \sim mv \sim m(Z\alpha)c. \quad (24)$$

هم چنین داریم

$$r \sim \frac{\hbar}{mcZ\alpha}, \quad k \sim \frac{\omega}{c} \sim \frac{E}{\hbar c} \sim \frac{1}{2} mc^2 (Z\alpha)^2 \frac{1}{\hbar c} \longrightarrow kr \sim \frac{1}{2} Z\alpha. \quad (25)$$

بنابراین برای بسیاری از اتم های سبک می توان تقریب $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx 1$ را بکاربرد. حال به محاسبه دقیق عنصر ماتریسی می پردازیم. با استفاده از رابطه $\mathbf{P} = \frac{m}{i\hbar} [\mathbf{r}, H]$ داریم

$$\langle \psi_f | \mathbf{P} | \psi_i \rangle = \frac{m}{i\hbar} \langle \psi_f | [\mathbf{r}, H] | \psi_i \rangle = \frac{m}{i\hbar} (E_i - E_f) \langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle. \quad (26)$$

باتعریف $\omega_{fi} := \frac{E_f - E_i}{\hbar}$ بدست می آوریم

$$\langle \psi_f | \mathbf{P} | \psi_i \rangle = i\omega_{fi} \langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle. \quad (27)$$

حال عبارت $\epsilon \cdot \langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle$ را باین فرض که حالت های اولیه و نهایی ویژه حالت های یک اتم هیدروژن گونه هستند محاسبه می کنیم:

$$\begin{aligned} \mathbf{e} \cdot \langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle &= \mathbf{e} \cdot \langle \psi_{n_f, l_f, m_f} | \mathbf{r} | \psi_{n_i, l_i, m_i} \rangle \\ &= \int_0^\infty r^3 dr R_{n_f, l_f}(r) R_{n_i, l_i}(r) dr \times \int d\Omega Y_{l_f, m_f}^*(\theta, \phi) (\mathbf{e} \cdot \mathbf{r}) Y_{l_i, m_i}(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (28)$$

برای محاسبه این انتگرال توجه می‌کنیم که می‌توان $\mathbf{e} \cdot \mathbf{r}$ را برحسب هارمونیک‌های کروی نوشت. داریم

$$\mathbf{e} \cdot \mathbf{r} = e_x \sin \theta \cos \phi + e_y \sin \theta \sin \phi + e_z \cos \theta, \quad (29)$$

و از این مطلب استفاده می‌کنیم که

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \cos \theta, \quad Y_{1,1} = -\sqrt{\frac{8\pi}{3}} \sin \theta e^{i\phi}, \quad Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} \sin \theta e^{-i\phi}. \quad (30)$$

بدین ترتیب می‌توانیم بنویسیم

$$\mathbf{e} \cdot \mathbf{r} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left(e_z Y_{1,0} + \frac{-e_x + ie_y}{2} Y_{1,1} + \frac{e_x + ie_y}{2} Y_{1,-1} \right). \quad (31)$$

این رابطه نشان می‌دهد که عنصر ماتریسی متناسب با جملاتی از نوع زیر است:

$$\int d\Omega Y_{l_f, m_f}^* Y_{1, m} Y_{l_i, m_i}, \quad m = 0, 1, -1. \quad (32)$$

توجه به انتگرال روی زاویه ϕ که به صورت $\int d\phi e^{-i(m_f - m - m_i)\phi}$ است اولین قاعده انتخاب را بدست می‌دهد و آن اینکه m_i و m_f می‌بایست در شرط زیر صدق کنند:

$$m_f - m_i = 0, 1, -1. \quad (33)$$

دومین قاعده انتخاب از این جابدهست می‌آید که توجه کنیم حاصلضرب دو هارمونیک کروی را می‌توان به صورت زیر برحسب هارمونیک‌های کروی دیگر نوشت:

$$Y_{l_1, m_1} Y_{l_2, m_2} \sim \sum_{L=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} Y_{L, m_1+m_2}, \quad (34)$$

که در آن منظور از علامت \sim آن است که ضرایب عددی را در جمع ننوشته‌ایم. جایگذاری این رابطه در انتگرال 32 و توجه به تعامد هارمونیک‌های کروی نشان می‌دهد که l_f و l_i در یک شرط دیگر نیز می‌بایست صدق کنند:

$$l_f - l_i = 1, 0, -1. \quad (35)$$

اماتوجه به پارامتر هارمونیک‌های کروی برابر بودن l_f و l_i را حذف می‌کند زیرا در این صورت نیز انتگرال 32 صفر می‌شود. بنابراین در مجموع به دو قاعده انتخاب رسیدیم که در زیر آنها را بازنویسی می‌کنیم:

$$\begin{aligned}\Delta m &= 1, 0 \\ \Delta l &= 1.\end{aligned}\quad (36)$$

توجه کنید که این قواعد انتخاب تنها برای تشعشع دوقطبی و آنهم دررتبه اول اختلال برقراراست و به این معناییست که هرگز هیچ گذاری بین ترازهای انرژی بااین مشخصات رخ نخواهد داد.

۷ گذار $2p \rightarrow 1s$

قواعد انتخابی که دربالا بدست آوردیم برای تمام گذارهای تابشی در تقریب دوقطبی برقرار هستند. در این بخش به محاسبه نرخ تابش از یک گذار خاص یعنی گذار $2p \rightarrow 1s$ می پردازیم. برای این گذار داریم

$$\omega_{i,f} = \frac{1}{\hbar} \frac{1}{2} m c^2 \left(1 - \frac{1}{4}\right) = \frac{3}{8} \frac{m c^2}{\hbar} (Z\alpha)^2. \quad (37)$$

حال به محاسبه صریح عنصر ماتریسی برای این گذار خاص می پردازیم. نخست انتگرال شعاعی را محاسبه می کنیم. برای انتگرال شعاعی داریم

$$\begin{aligned}I_R &:= \int_0^\infty dr r^3 R_{10}^*(r) R_{21} = \int_0^\infty dr r^3 \left[2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-Zr/a_0} \right] \left[\frac{1}{\sqrt{24}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{5}{2}} r e^{-Zr/2a_0} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^4 \int_0^\infty dr r^4 e^{-3Zr/2a_0} \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^4 \left(\frac{2a_0}{3Z}\right)^5 \int_0^\infty dx x^4 e^{-x} = \frac{24}{\sqrt{6}} \left(\frac{2}{3}\right)^5 Z^{-1} a_0\end{aligned}\quad (38)$$

برای انتگرال زاویه ای داریم

$$\begin{aligned}I_A &:= \int d\Omega Y_{00}^*(\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{r}}) Y_{1,m} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int d\Omega \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left(e_z Y_{1,0} + \frac{-e_x + i e_y}{2} Y_{1,1} + \frac{e_x + i e_y}{2} Y_{1,-1} \right) Y_{1,m} \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(e_z \delta_{0,m} + \frac{-e_x + i e_y}{\sqrt{2}} \delta_{1,m} + \frac{e_x + i e_y}{\sqrt{2}} \delta_{-1,m} \right).\end{aligned}\quad (39)$$

باترکیب انتگرال های شعاعی و زاویه ای بدست می آوریم

$$|I_R I_A|^2 = 96 \left(\frac{2}{3}\right)^{10} \left(\frac{a_0}{Z}\right)^2 \frac{1}{3} \left[\delta_{m,0} e_z^2 + \frac{1}{2} (\delta_{m,1} + \delta_{m,-1}) (e_x^2 + e_y^2) \right], \quad (40)$$

حال باید دقت کنیم که مولفه های e_x , e_y و e_z از آنجا که در صفحه عمود بر بردار موج فوتون قرار دارند، بستگی به زاویه انتشار فوتون دارند و این موضوع محاسبه انتگرال ?? را دشوار می کند. اما توجه به یک نکته مارا از دشواری این محاسبه می

رهند و آن اینکه اتمی که به حالت $2P$ برانگیخته شده است با احتمال مساوی در هر کدام از لایه های $|2, 1, m\rangle$ قرار دارد. بنابراین نرخ گذار $2P \rightarrow 1S$ را می بایست با جمع زدن روی تمام گذارهای $2P_m \rightarrow 1S$ انجام داد. یعنی

$$R_{2P \rightarrow 1S} = \frac{1}{3} \sum_m R_{2P_m \rightarrow 1S}. \quad (41)$$

در نتیجه آنچه که در انتگرال روی زاویه فوتون های گسیل شده می بایست محاسبه شود کمیت زیر است:

$$\frac{1}{3} \sum_m \left[\delta_{m,0} e_z^2 + \frac{1}{2} (\delta_{m,1} + \delta_{m,-1}) (e_x^2 + e_y^2) \right] = \frac{1}{3} (e_z^2 + e_x^2 + e_y^2) = \frac{1}{3}, \quad (42)$$

و انتگرال این عبارت روی زاویه هابرابر با $\frac{4\pi}{3}$ خواهد بود.

هم چنین می بایست نرخ گذار نهایی را در یک فاکتور ۲ ضرب کنیم زیرا می خواهیم نرخ تابش را مستقل از اینکه فوتون گسیل شده چه قطبشی دارد محاسبه کنیم. بنابراین نرخ گذار نهایی برابر خواهد شد با:

$$\begin{aligned} R_{2P \rightarrow 1S} &= 2 \times \frac{1}{2\pi} \alpha \frac{\omega^3}{c^2} \times \left(\frac{2}{3}\right)^{10} \left(\frac{a_0}{Z}\right)^2 \frac{1}{3} \times \frac{4\pi}{3} \\ &= 2 \left(\frac{2}{3}\right)^8 \frac{mc^2}{\hbar} \alpha (Z\alpha)^4 \approx 0.6 \times 10^9 Z^4 \text{ sec}^{-1}. \end{aligned} \quad (43)$$

برای اتم هیدروژن با $Z = 1$ این نرخ برابر خواهد بود با 0.6×10^9 بر ثانیه. معنای این نتیجه چیست؟ از آنجا که $R_{i \rightarrow f}$ نرخ گذار است، می فهمیم که در مدت زمان dt ثانیه احتمال گذار یک اتم از لایه $2P$ به لایه $1S$ برابر است با $R_{i \rightarrow f} dt$. از هر N اتم که در لایه $2P$ هستند در این مدت زمان تعداد $N R_{i \rightarrow f} dt$ اتم به لایه $1S$ گذار می کنند و فوتون هایی با فرکانس ω گسیل می کنند. بنابراین توان تابش شده برابر خواهد بود با

$$P = N \hbar \omega R_{i \rightarrow f}. \quad (44)$$

اگر N تعداد اتم ها در واحد حجم باشد، توان بالا انرژی تابشی در واحد زمان در واحد حجم از گازی است که ملتهب شده و اتم های آن به لایه $2P$ تحریک شده اند. البته وقتی که دمای گاز ملتهب شده برابر با T باشد، اتم های گاز با احتمالات بولتزمن در لایه های مختلف هستند.

هم چنین می توان طول عمر یک لایه را نیز بدست آورد. اتم های باقی مانده در لایه i در زمان t را با $N_i(t)$ نمایش می دهیم. بنابراین آنچه که در بالا گفتیم داریم

$$N_i(t + dt) = N_i(t) - N_i(t) \left(\sum_f R_{i \rightarrow f} \right) dt, \quad (45)$$

باتعریف

$$\tau := \frac{1}{\sum_f R_{i \rightarrow f}} \quad (46)$$

می توان معادله بالا را به شکل زیر نوشت:

$$\frac{dN(t)}{dt} = -\frac{1}{\tau}N(t) \quad (47)$$

که حل آن عبارت است از:

$$N(t) = N(0)e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (48)$$

این عبارت نشان می دهد که $\tau = \frac{1}{\sum_f R_{i \rightarrow f}}$ طول عمر لایه i است. بااین حساب طول عمر لایه $2P$ در اتم هیدروژن برابر خواهد بود با

$$\tau \approx 1.6 \times 10^{-9} \text{ ثانیه}. \quad (49)$$

این زمان در مقیاس های ماکروسکوپی زمانی بسیار کوتاه ولی در مقیاسه با مقیاس زمانی اتم مثلاً پیوند گردش الکترون به دور هسته (از مرتبه 10^{-15} ثانیه) زمانی بسیار طولانی است.

۸ تاثیر اسپین در گذارهای تابش

تاکنون تابش از یک اتم ایده آل شبه هیدروژن را مطالعه کرده ایم. می دانیم که در یک اتم واقعی شبه هیدروژن آثاری مانند برهم کنش اسپین مدار یا اثرات نسبیتی نیز وجود دارند. این آثار باعث می شوند که بعضی از واگنی های لایه های انرژی از بین بروند. در این قسمت می خواهیم گذار $2P \rightarrow 1S$ را برای یک اتم واقعی مطالعه کنیم. در اثر برهم کنش اسپین مدار یک لایه $2P$ به یک لایه چهارتایی $2P_{\frac{3}{2}}$ و یک لایه دوتایی $2P_{\frac{1}{2}}$ شکافته می شود. زیر نویس های $\frac{3}{2}$ و $\frac{1}{2}$ نشان دهنده مقدار J در این چندتایی ها هستند. هم چنین لایه دوتایی $1S$ نیز که قبلاً واگن بود به دو لایه شکافته می شود که این دو لایه را با $1S_{\frac{1}{2}}$ نشان می دهیم. چهار لایه $2P_{\frac{3}{2}}$ و توابع موج آنها عبارتند از:

$$\begin{aligned} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle &= Y_{1,1}\chi_+ \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,0}\chi_+ + \sqrt{\frac{1}{3}}Y_{1,1}\chi_- \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}}Y_{1,-1}\chi_+ + \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,0}\chi_- \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{-3}{2} \right\rangle &= Y_{1,-1}\chi_- \end{aligned} \quad (50)$$

هم چنین دو لایه $2P_{\frac{1}{2}}$ و توابع موج آنها عبارتند از:

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}Y_{1,0}\chi_- - \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,1}\chi_-$$

$$|\frac{1}{2}, \frac{-1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,-1}\chi - \sqrt{\frac{1}{3}}Y_{1,0}\chi. \quad (51)$$

وسرانجام دو لایه $1S_{\frac{1}{2}}$ و توابع موج آنها عبارتند از:

$$\begin{aligned} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle' &= Y_{0,0}\chi_+ \\ |\frac{1}{2}, \frac{-1}{2}\rangle' &= Y_{0,0}\chi_-. \end{aligned} \quad (52)$$

شکل ?? وضعیت این لایه های انرژی و گذارهای $2P \rightarrow 1S$ را نشان می دهد. باید دقت کنیم که انرژی لایه $2P_{\frac{3}{2}}$ به مقدار بسیار کمی از انرژی لایه های $2P_{\frac{1}{2}}$ بیشتر است. این تفاوت باعث می شود که وقتی در طیف سنجی به خط طیفی $1S \rightarrow 2P$ با دقت بیشتری نگاه می کنیم به صورت دو خط بسیار نزدیک به هم دیده شود. یکی از این خطوط در واقع ناشی از گذار $1S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 2P_{\frac{3}{2}}$ و دیگری ناشی از گذار $1S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 2P_{\frac{1}{2}}$ است. اختلاف فرکانس این دو نیز درست متناسب با اختلاف انرژی دو لایه $2P_{\frac{3}{2}}$ و $2P_{\frac{1}{2}}$ است. به همین دلیل هم هست که به اثر جفتیدگی $L-S$ شکافت ریز می گویند. آنچه که می خواهیم در این بخش بفهمیم آن است که نسبت شدت این دو خط به یکدیگر چقدر است؟ برای این کار توجه می کنیم که در هر دو گذار انتگرال های شعاعی یکسان هستند ولی انتگرال های زاویه ای برای آنها متفاوت است. گذار $1S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 2P_{\frac{3}{2}}$ در واقع از ۸ گذار مختلف تشکیل شده است. جدول ۸ این گذارها و قسمت زاویه ای عنصر ماتریسی مربوط به هریک را نشان می دهد. دقت کنید که عناصر ماتریسی را محاسبه نکرده ایم زیرا تنها نسبت بین شدت خطوط برایمان اهمیت دارد. در این جدول عنصر ماتریسی $\langle Y_{00} | e \cdot \mathbf{P} | Y_{1,-1} \rangle = \langle Y_{00} | e \cdot \mathbf{P} | Y_{11} \rangle$ را با C نشان داده ایم. خواننده خود می تواند با توجه به محاسبات بخش قبل دریابد که چرا این دو عنصر ماتریسی با هم مساوی هستند.

هم چنین گذار $1S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 2P_{\frac{1}{2}}$ از ۴ گذار مختلف تشکیل شده است. جدول ۸ این گذارها و قسمت زاویه ای عنصر ماتریسی مربوط به هریک را نشان می دهد. بامقایسه این دو جدول بدست می آوریم

$$\frac{R(2P_{3/2} \rightarrow 1S_{1/2})}{R(2P_{1/2} \rightarrow 1S_{1/2})} = \frac{\frac{8}{3}C}{\frac{4}{3}C} = 2. \quad (53)$$

$2P_{\frac{3}{2}} \longrightarrow 1S_{\frac{1}{2}}$	
$m_j = \frac{3}{2} \longrightarrow m_j = \frac{1}{2}$	$ \langle Y_{00} \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} Y_{11} \rangle ^2 =: C$
$m_j = \frac{3}{2} \longrightarrow m_j = \frac{-1}{2}$	0
$m_j = \frac{1}{2} \longrightarrow m_j = \frac{1}{2}$	$\frac{2}{3} \langle Y_{00} \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} Y_{10} \rangle ^2 = 0$
$m_j = \frac{1}{2} \longrightarrow m_j = \frac{-1}{2}$	$\frac{2}{3} \langle Y_{00} \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} Y_{11} \rangle ^2 = \frac{2}{3} C$
$m_j = \frac{-1}{2} \longrightarrow m_j = \frac{1}{2}$	$\frac{1}{3} \langle Y_{00} \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} Y_{11} \rangle ^2 = \frac{1}{3} C$
$m_j = \frac{-1}{2} \longrightarrow m_j = \frac{-1}{2}$	$\frac{1}{3} \langle Y_{00} \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} Y_{1,-1} \rangle ^2 = 0$
$m_j = \frac{-3}{2} \longrightarrow m_j = \frac{1}{2}$	0
$m_j = \frac{-3}{2} \longrightarrow m_j = \frac{-1}{2}$	$ \langle Y_{00} \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} Y_{1,-1} \rangle ^2 =: C$

1: $2P_{\frac{3}{2}} \longrightarrow 1S_{\frac{1}{2}}$ مجموعه گذارهای

$2P_{\frac{1}{2}} \longrightarrow 1S_{\frac{1}{2}}$	
$m_j = \frac{1}{2} \longrightarrow m_j = \frac{1}{2}$	$\frac{1}{3} \langle Y_{0,0} \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} Y_{1,0} \rangle ^2 = 0$
$m_j = \frac{1}{2} \longrightarrow m_j = \frac{-1}{2}$	$\frac{2}{3} \langle Y_{0,0} \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} Y_{1,1} \rangle ^2 = \frac{2}{3} C$
$m_j = \frac{-1}{2} \longrightarrow m_j = \frac{1}{2}$	$\frac{2}{3} \langle Y_{0,0} \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} Y_{1,-1} \rangle ^2 = \frac{2}{3} C$
$m_j = \frac{-1}{2} \longrightarrow m_j = \frac{-1}{2}$	$\frac{1}{3} \langle Y_{0,0} \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} Y_{10} \rangle ^2 = 0$

2: $2P_{\frac{1}{2}} \longrightarrow 1S_{\frac{1}{2}}$ مجموعه گذارهای