

ПОПРАВКИ ПОРЯДКА $\alpha^4(m/M)R_\infty$ К P -УРОВНЯМ ВОДОРОДА

Э. А. Голосов*, А. С. Елховский, А. И. Мильштейн, И. Б. Хриплович

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера
630090, Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 4 октября 1994 г.

Найдены поправки порядка $\alpha^4(m/M)R_\infty$ к P -уровням водорода. Они имеют преимущественно релятивистскую природу. Метод вычислений является непосредственным обобщением подхода, использованного нами ранее для нахождения сдвига P -уровней позитрония. Найденные поправки к лэмбовскому сдвигу в водороде составляют численно $\delta E(2P_{1/2}) = 0.55$ кГц, $\delta E(2P_{3/2}) = 0.44$ кГц.

1. ВВЕДЕНИЕ

Высокая точность, достигнутая к настоящему времени в измерениях $2S_{1/2} - 2P_{1/2}$ -интервала в водороде:

$$\begin{aligned} & 1057845(9) \text{ кГц [1],} \\ & 1057851.4(1.9) \text{ кГц [2],} \end{aligned}$$

делает актуальным достижение соответствующей точности теоретического предсказания. В частности, поправка на отдачу ядра относительного порядка $\alpha^4(m/M)R_\infty$ ($R_\infty = 109737.3156827(48) \text{ см}^{-1}$ — постоянная Ридберга) могла бы оказаться сравнимой с погрешностью эксперимента [2]. Действительно, в позитронии поправки относительного порядка $\alpha^4 R_\infty$, вычисленные в [3, 4] для $2S$ -состояния и в [5] для $2P$ -состояния, составляют 1 МГц и 0.6 МГц соответственно. Обсуждаемые в настоящей статье поправки для водорода должны быть примерно в $8m/M$ раз меньше. Здесь коэффициент 8 отражает зависимость результата для позитрония от его приведенной массы $m/2$, входящей в ответ по крайней мере в третьей степени. Таким образом, в водороде можно было бы ожидать поправку на уровне 2–3 кГц.

Поправка относительного порядка $\alpha^4(m/M)R_\infty$ к энергии $2S$ -состояния водорода вычислена недавно в работе [6] и составляет -0.92 кГц. Что же касается P -состояний, соответствующие поправки могут быть достаточно просто найдены в рамках подхода, развитого нами при вычислении сдвига P -уровней позитрония [5]. Это и составляет предмет настоящей работы.

Поправки к энергии, содержащие m/M , возникают двойко. Часть эффективных операторов возмущения содержит обратную массу ядра явно. А в случае операторов, не содержащих массу ядра, она возникает в соответствующих поправках к энергии вследствие зависимости от приведенной массы нерелятивистских волновых функций, используемых нами в качестве базиса теории возмущений.

*Новосибирский государственный университет.

Основная часть поправок имеет релятивистскую природу. Радиационные же поправки обсуждаемого порядка для состояний с ненулевым орбитальным моментом возникают лишь благодаря аномальному магнитному моменту электрона [7, 5]. Строгое доказательство этого факта дано в работе [8].

2. ВКЛАДЫ НЕПРИВОДИМЫХ ОПЕРАТОРОВ

2.1. Релятивистская поправка к закону дисперсии

Начнем с кинематической поправки к энергии, возникающей в результате усреднения второй поправки к нерелятивистскому закону дисперсии для электрона:

$$\sqrt{m^2 + p^2} - m = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3} + \frac{p^6}{16m^5} + \dots, \quad (1)$$

$$V_{\text{kin}}^{(1)} = \frac{p^6}{16m^5}. \quad (2)$$

В результате усреднения по нерелятивистским волновым функциям получаем

$$E_{\text{kin}}^{(1)} = -\frac{m^2}{M} \frac{\partial}{\partial \mu} \left\langle \frac{p^6}{16m^5} \right\rangle = \quad (3)$$

$$= -\frac{\epsilon_n}{5} \left(8 - \frac{17}{n^2} + \frac{75}{8n^3} \right). \quad (4)$$

Здесь

$$\mu = \frac{mM}{M+m} \approx m \left(1 - \frac{m}{M} \right)$$

— приведенная масса,

$$\epsilon_n \equiv \frac{m^2 \alpha^6}{Mn^3}.$$

От соответствующего результата для позитрония [5] найденная поправка отличается лишь очевидным масштабным фактором.

2.2. Релятивистские поправки к кулоновскому взаимодействию

Поправка четвертого порядка по v/c к однократному кулоновскому обмену извлекается из амплитуды рассеяния свободных частиц и составляет

$$V_C = -\frac{\alpha}{32m^4} \frac{4\pi}{q^2} \left\{ \frac{5}{4} (p'^2 - p^2)^2 - 3i (\boldsymbol{\sigma} [\mathbf{p}'\mathbf{p}]) (p'^2 + p^2) \right\}, \quad (5)$$

где

$$\mathbf{q} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}.$$

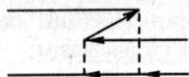


Рис. 1. Z-график с двойным кулоновским обменом

Здесь и в дальнейшем мы опускаем операторы, пропорциональные $\delta(\mathbf{r})$ в координатном представлении, так как их средние в P -состоянии равны нулю. В результате для поправки к энергии получаем

$$E_C^{(1)} = \epsilon_n \left\{ \frac{5}{16} \left(1 - \frac{2}{3n^2} \right) + \frac{3}{4} (\sigma \mathbf{l}) \left(1 - \frac{13}{12n^2} \right) \right\}. \quad (6)$$

Детали вычислений можно найти в работе [5].

Далее, в результате взаимодействия электрон может перейти в состояние с отрицательной энергией. Этот вклад описывается Z-графиком, представленным на рис. 1. Соответствующий оператор возмущения,

$$V_{C-} = -\frac{(4\pi\alpha)^2}{8m^3} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{k}(\mathbf{q}-\mathbf{k})}{k^2(\mathbf{q}-\mathbf{k})^2}, \quad (7)$$

приводит к сдвигу энергии

$$E_{C-}^{(1)} = -\frac{\epsilon_n}{5} \left(1 - \frac{2}{3n^2} \right). \quad (8)$$

2.3. Однократный магнитный обмен

В нековариантной теории возмущений амплитуда рассеяния электрона на протоне при однократном магнитном обмене имеет вид

$$A_M = -\frac{4\pi\alpha}{2q} j_i(\mathbf{p}', \mathbf{p}) J_j(-\mathbf{p}', -\mathbf{p}) \left(\frac{1}{E_n - q - p^2/2m} + \frac{1}{E_n - q - p'^2/2m} \right) \left(\delta_{ij} - \frac{q_i q_j}{q^2} \right). \quad (9)$$

В законе дисперсии для электрона теперь достаточно ограничиться ведущим нерелятивистским приближением. Ток протона с нужной точностью равен

$$\mathbf{J}(-\mathbf{p}', -\mathbf{p}) = -\frac{1}{2M} (\mathbf{p}' + \mathbf{p}). \quad (10)$$

Позднее мы обсудим сверхтонкое взаимодействие, вызванное спиновым током протона:

$$\mathbf{J}^s(-\mathbf{p}', -\mathbf{p}) = -\frac{1}{2M} i g [\sigma_p \mathbf{q}], \quad (11)$$

где $g = 2.79$ — магнитный момент протона.

В выражении для электронного тока необходимо удержать $(v/c)^2$ -поправки:

$$\mathbf{j}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = \frac{1}{2m} \{ \mathbf{p}' + \mathbf{p} + i [\sigma \mathbf{q}] \} \left(1 - \frac{p'^2 + p^2}{4m^2} \right) - \frac{(p'^2 - p^2)}{16m^3} i [\sigma (\mathbf{p}' + \mathbf{p})]. \quad (12)$$

Они приводят к следующему вкладу в энергию:

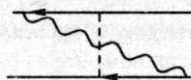


Рис. 2. Магнитный квант, пересеченный кулоновским



Рис. 3. Магнитный квант, пересеченный двумя кулоновскими

$$\begin{aligned}
 E_{\text{cut}}^{(1)} &= \left\langle \frac{\alpha}{4mM} \frac{4\pi}{q^2} \left\{ \frac{(p'^2 - p^2)^2}{4m^2} \frac{i(\sigma[\mathbf{q}\mathbf{p}])}{q^2} + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \frac{p'^2 + p^2}{2m^2} \left(2 \frac{[\mathbf{q}\mathbf{p}]^2}{q^2} + i(\sigma[\mathbf{q}\mathbf{p}]) \right) \right\} \right\rangle = \\
 &= \epsilon_n \left\{ \frac{7}{15} - \frac{31}{30n^2} + \frac{1}{2n^3} - \frac{\sigma\mathbf{l}}{4} \left(1 - \frac{1}{n^2} \right) \right\}. \tag{13}
 \end{aligned}$$

Рассмотрим теперь эффект запаздывания. Для токов можно ограничиться ведущим нерелятивистским приближением; возмущение интересующего нас порядка возникает из второго члена разложения энергетического фактора в (9) по степеням отношения $(E_n - p^2/2m)/q$:

$$E_{\text{ret}}^{(1)} = \left\langle - \frac{\alpha}{4mM} \frac{4\pi}{q^2} \frac{(E_n - p^2/2m)^2 + (E_n - p'^2/2m)^2}{q^2} \times \right. \tag{14}$$

$$\begin{aligned}
 &\times \left. \left\{ 2 \frac{[\mathbf{q}\mathbf{p}]^2}{q^2} + i(\sigma[\mathbf{q}\mathbf{p}]) \right\} \right\rangle = \\
 &= \epsilon_n \left\{ \frac{2}{5} - \frac{1}{4n} + \frac{3}{20n^2} + \frac{\sigma\mathbf{l}}{30} \left(4 - \frac{1}{n^2} \right) \right\}. \tag{15}
 \end{aligned}$$

Благодаря конечности времени распространения магнитного кванта, он может пересекать произвольное число кулоновских. Простой подсчет степеней импульсов показывает, что нам достаточно учесть, помимо вычисленного выше вклада, графики с одним и двумя кулоновскими квантами (пунктирные линии), пересеченными магнитным (волнистая линия). В первом случае (рис. 2) оператор возмущения получается как произведение паулиевских токов на первый член разложения по $(E_n - p^2/2m)/q$:

$$\begin{aligned}
 E_{\text{MC}}^{(1)} &= \left\langle - (4\pi\alpha)^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}}{2k(\mathbf{q} - \mathbf{k})^2} \times \right. \\
 &\quad \times \left(J_i(\mathbf{p}, \mathbf{p} + \mathbf{k}) j_j(\mathbf{p}', \mathbf{p}' + \mathbf{k}) \frac{2E_n - (\mathbf{p}' - \mathbf{k})^2/2m - p^2/2m}{k^3} + \right. \\
 &\quad \left. \left. + J_i(\mathbf{p}', \mathbf{p}' + \mathbf{k}) j_j(\mathbf{p}, \mathbf{p} + \mathbf{k}) \frac{2E_n - (\mathbf{p} + \mathbf{k})^2/2m - p'^2/2m}{k^3} \right) \right\rangle = \tag{16}
 \end{aligned}$$

$$= \epsilon_n \left\{ - \frac{13}{20} + \frac{1}{2n} - \frac{3}{20n^2} - \sigma\mathbf{l} \left(\frac{7}{60} + \frac{1}{30n^2} \right) \right\}. \tag{17}$$

Во втором случае все элементы графика (рис. 3) достаточно взять в ведущем нерелятивистском приближении:



Рис. 4. Z-график с однократным магнитным обменом

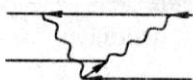


Рис. 5. Двойной магнитный обмен

$$E_{\text{MCC}}^{(1)} = \left\langle -(4\pi\alpha)^3 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \frac{\delta_{ij} - k_i k_j / k^2}{2k^4(\mathbf{q} - \mathbf{k}')^2(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2} \times \right. \\ \left. \times \{J_i(\mathbf{p}, \mathbf{p} + \mathbf{k})j_j(\mathbf{p}', \mathbf{p}' + \mathbf{k}) + J_i(\mathbf{p}', \mathbf{p}' + \mathbf{k})j_j(\mathbf{p}, \mathbf{p} + \mathbf{k})\} \right\rangle = \quad (18)$$

$$= \frac{\epsilon_n}{4} \left\{ \frac{5}{3} - \frac{1}{n} + \frac{\sigma \mathbf{l}}{3} \right\}. \quad (19)$$

Еще один вклад в энергию порядка $\alpha^4(m/M)R_\infty$ при однократном магнитном обмене возникает из Z-графиков (см. рис. 4). В ведущем нерелятивистском приближении нетрудно получить

$$E_{\text{M-}}^{(1)} = \left\langle \frac{\alpha^2}{4mM} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi)^2}{k^2(\mathbf{q} - \mathbf{k})^2} i(\sigma, [\mathbf{k}\mathbf{p}]) \right\rangle = \quad (20)$$

$$= -\frac{\epsilon_n}{10} \left(1 - \frac{2}{3n^2} \right) \sigma \mathbf{l}. \quad (21)$$

2.4. Двойной магнитный обмен

Нам осталось рассмотреть неприводимые графики с двумя магнитными квантами. Вклад нужного порядка в энергию возникает только из графиков типа представленного на рис. 5. Их сумма сводится к

$$E_{\text{MM}}^{(1)} = \left\langle \frac{\alpha^2}{2m^2M} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi)^2}{k^2 k'^2} \left\{ \mathbf{p}\mathbf{p}' - 2 \frac{(\mathbf{k}\mathbf{p})(\mathbf{k}\mathbf{p}')}{k^2} + \frac{(\mathbf{k}\mathbf{p})(\mathbf{k}\mathbf{k}')(\mathbf{k}\mathbf{p}')}{k^2 k'^2} - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}'}{2} + \right. \right. \\ \left. \left. + i\sigma \left([\mathbf{k}'\mathbf{p}] - \frac{[\mathbf{k}'\mathbf{k}](\mathbf{k}\mathbf{p})}{k^2} \right) \right\} \right\rangle = \quad (22)$$

$$= \epsilon_n \left\{ \frac{1}{3} \left(1 - \frac{1}{n^2} \right) - \frac{\sigma \mathbf{l}}{10} \left(1 - \frac{2}{3n^2} \right) \right\}, \quad (23)$$

где $\mathbf{k}' = \mathbf{q} - \mathbf{k}$.

3. ИТЕРАЦИЯ БРЕЙТОВСКОГО ГАМИЛЬТОНИАНА

Следующий класс поправок порядка $\alpha^4(m/M)R_\infty$ возникает от итерации обычного брейтовского гамильтониана V второго порядка по v/c .

Опуская слагаемые, содержащие $\delta(\mathbf{r})$ и спин протона, представим потенциал Брейта ([9], §84)

$$V = -\frac{p^4}{8m^3} + \frac{\alpha}{4m^2r^3} \sigma \mathbf{l} - \frac{\alpha}{2mMr} \left(p^2 + \frac{1}{r^2} \mathbf{r}(\mathbf{r}\mathbf{p})\mathbf{p} \right) + \frac{\alpha}{2mMr^3} \sigma \mathbf{l} \quad (24)$$

в виде

$$V = m\alpha^4 v, \quad (25)$$

$$v = a \left\{ h, \frac{1}{r} \right\} + b[h, ip_r] + c \frac{1}{r^2}. \quad (26)$$

Здесь

$$a = -\frac{1}{2} + \frac{m}{M}, \quad b = \frac{\sigma \mathbf{l}}{8} + \frac{m}{M} \left(\frac{1}{2} - \frac{\sigma \mathbf{l}}{8} \right), \quad c = -\frac{1}{2} + b; \quad (27)$$

$p_r = -i(\partial_r + 1/r)$ — радиальный импульс, а

$$h = \frac{p_r^2}{2} + \frac{1}{r^2} - \frac{1}{r}$$

— невозмущенный гамильтониан для радиального движения с $L = 1$ в кулоновском поле.

Представление (26) позволяет найти поправку к энергии без использования явного вида кулоновской функции Грина. Детали вывода применительно к позитронию можно найти в работе [5]. Для водорода результат имеет вид*

$$\Delta E = \frac{m^2 \alpha^6}{4\mu n^3} \left\{ -\frac{3a^2 + 14ab + 13b^2}{15} - \frac{2c(2c + 9a + 9b)}{27} - \frac{2c^2}{3n} + \frac{2}{3n^2} \left(\frac{11a^2 + 13ab + 6b^2}{5} + 4ac \right) - \frac{5a^2}{2n^3} \right\}. \quad (28)$$

Подставляя выражения для коэффициентов a, b, c (27) и выделяя члены $\propto M^{-1}$, находим

$$E^{(2)} = \epsilon_n \left\{ \frac{467}{480} + \frac{3}{16n} - \frac{347}{120n^2} + \frac{15}{8n^3} - \sigma \mathbf{l} \left(\frac{419}{960} + \frac{3}{32n} - \frac{53}{80n^2} \right) \right\}. \quad (29)$$

4. ПОПРАВКИ К СВЕРХТОНКОМУ ВЗАИМОДЕЙСТВИЮ

Полное релятивистское выражение для сверхтонкого расщепления уровней атома водорода сводится к среднему от потенциала взаимодействия релятивистского электрона с магнитным моментом ядра по дираковским волновым функциям в кулоновском поле:

$$\delta E_{nfs}(nlj; F) = \alpha \mu \left\langle nlj \left| \left[\frac{\mathbf{r}}{r^3} \boldsymbol{\alpha} \right] \right| nlj \right\rangle. \quad (30)$$

Здесь μ — оператор ядерного магнитного момента, содержащий $1/M$, α — матрицы Дирака. Это выражение можно получить [10] из анализа фейнмановских диаграмм, подобно выводу самого уравнения Дирака в кулоновском поле.

Радиальная часть среднего (30) проще всего вычисляется с помощью вириальных соотношений (см., например, [11]). Окончательный результат имеет вид

$$\delta E_{nfs}(nlj; F) = \frac{(\mu j)}{j(j+1)} \left[j(j+1) - l(l+1) + \frac{1}{4} \right] \alpha^2 \frac{\partial E_{nj}}{\partial \kappa} \frac{E_{nj} - m/2\kappa}{j(j+1) - \alpha^2}, \quad (31)$$

где E_{nj} — энергия связанного состояния в релятивистской кулоновской задаче, $\kappa = (l-j)(2j+1)$.

Разумеется, обсуждаемая релятивистская поправка к сверхтонкому взаимодействию может быть найдена так же, как и вклад, не зависящий от спина ядра (см. предыдущие разделы). При этом вклады запаздывания при однократном магнитном обмене и диаграмм 2 и 3 взаимно сокращаются, что как раз и соответствует мгновенному характеру взаимодействия, описываемого формулой (30). Окончательный результат вычисления (приведенный в следующем разделе) совпадает с соответствующим порядком α^2 -разложения точного выражения (31).

5. НАСТОЯЩИЕ РАДИАЦИОННЫЕ ПОПРАВКИ

Даже истинные радиационные поправки порядка $\alpha^4 R_\infty m/M$ к энергии P -уровней могут быть представлены в простой форме практически без специальных вычислений. Как предполагалось в работах [7, 5] и было строго доказано в [8], все истинные радиационные поправки к уровням с $l \neq 0$ сводятся к вкладу аномального магнитного момента электрона в однократный магнитный обмен и спин-орбитальное взаимодействие¹⁾.

Легко показать, что лишь поправка второго порядка к аномальному магнитному моменту электрона, $-0.328\alpha^2/\pi^2$, влияет на сдвиг $\sim \alpha^4(m/M)R_\infty$ уровней с $l \neq 0$. В частности, как и в позитронии, вклады аномального момента в запаздывание и в график 2 взаимно компенсируются.

Таким образом мы приходим к следующему выражению для радиационного сдвига nP -уровней водорода:

$$E_{\text{rad}}^{(1)} = \epsilon_n \frac{0.328}{\pi^2} \left\{ \frac{1}{3} \sigma \mathbf{l} + 2.79 \frac{(\sigma \mathbf{l})(\mathbf{j} \sigma_p)}{12j(j+1)} \right\}. \quad (32)$$

¹⁾К сожалению, в работе [5] вклад аномального магнитного момента в спин-орбитальное взаимодействие был пропущен. Соответствующая поправка к P -уровням позитрония составляет

$$-\frac{0.328}{\pi^2} \frac{m\alpha^6}{24n^3} \text{LS},$$

что дает 0.0032, 0.0016 и -0.0016 МГц для $j = 0, 1$ и 2 соответственно и практически не влияет на окончательные численные результаты.

6. РЕЗУЛЬТАТЫ

Полная поправка к P -уровням водорода без учета спина ядра составляет

$$\delta E(nP_j) = \epsilon_n \left\{ \frac{217}{480} + \frac{3}{16n} - \frac{14}{15n^2} + \frac{1}{2n^3} - \sigma_1 \left(\frac{7}{192} + \frac{3}{32n} - \frac{1}{6n^2} - \frac{1}{3} \frac{0.328}{\pi^2} \right) \right\}. \quad (33)$$

Численные значения этой поправки для $n = 2$ равны

$$\delta E(2P_{1/2}) = 0.55 \text{ кГц},$$

$$\delta E(2P_{3/2}) = 0.44 \text{ кГц}.$$

Они оказались несколько меньше грубой оценки, приведенной в начале статьи.

Поправки к сверхтонкой структуре в состояниях с фиксированным полным моментом F можно представить в аналогичной форме:

$$\delta E(nP_j; F) = \epsilon_n 2.79 \frac{j\sigma_p}{2j(j+1)} \left\{ \frac{157}{270} + \frac{2}{3n} - \frac{7}{5n^2} - \sigma_1 \left(\frac{173}{540} + \frac{1}{6n} - \frac{2}{15n^2} - \frac{1}{6} \frac{0.328}{\pi^2} \right) \right\}. \quad (34)$$

Численно вклады в сверхтонкое расщепление $2P_j$ -уровней равны

$$\Delta_{hf}(2P_{1/2}) = 6.12 \text{ кГц},$$

$$\Delta_{hf}(2P_{3/2}) = 0.38 \text{ кГц}.$$

Мы признательны Г. Гротчу за сообщение результатов работы [6] до ее опубликования.

Работа частично финансировалась Программой «Университеты Россия» (грант 94-6.7-2053).

Литература

1. S. R. Lundeen and F. M. Pipkin, Phys. Rev. Lett. **46**, 232 (1981).
2. В. Г. Пальчиков, Ю. Л. Соколов, В. П. Яковлев, Письма в ЖЭТФ **38**, 347 (1983).
3. R. N. Fell, Phys. Rev. Lett. **68**, 25 (1992).
4. I. V. Khrplovich, A. I. Milstein, and A. S. Yelkhovsky, Physica Scripta T **46**, 252 (1993).
5. I. V. Khrplovich, A. I. Milstein, and A. S. Yelkhovsky, Phys. Rev. Lett. **71**, 4323 (1993); ЖЭТФ **105**, 299 (1994).
6. K. Pachucki and H. Grotch, направлено в Phys. Rev. A (1995).
7. M. Douglas and N. M. Kroll, Ann. Phys. **82**, 89 (1974).
8. M. I. Eides, I. V. Khrplovich, and A. I. Milstein, Phys. Lett. B **339**, 257 (1994).
9. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1980).
10. В. М. Шабаев, ТМФ **63**, 394 (1985).
11. V. M. Shabaev, J. Phys. B **24**, 4479 (1991).