Письма в ЖЭТФ, том 39, вып. 7, стр. 315 – 317 *10 апреля 1984 г.*

ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЙ СДВИГ УРОВНЕЙ μ-МЕЗОАТОМА

Д.А.Киржниц, Ф.М.Пеньков

Найден поляризационный сдвиг уровней (и соответствующий поляризационный потенциал) мезоатомов с $Z \sim 10 - 50$, у которых кулоновская энергия мюона порядка или больше характерной энергии возбуждения ядра.

Прогресс мезоатомной спектроскопии [1] требует повышения точности атомных расчетов, побуждая учитывать все более тонкие физические эффекты (и открывая тем самым новые источники информации о структуре ядра и фундаментальных взаимодействиях). К числу таких эффектов относится поляризационный сдвиг (ПС) атомных уровней, связанный с виртуальными дипольными возбуждениями ядра (см. [2]).

Недавние вычисления ПС мезоатома [2–4] основывались на малости отношения σ кулоновской энергии мюона к характерной энергии возбуждения ядра

$$\sigma \infty MR^2/ma_0^2 << 1. \tag{1}$$

Здесь $a_0 = \hbar^2/Ze^2m$ – боровский радиус, $-e$, m – заряд и масса мюона, Ze, R – заряд и радиус ядра, M – масса нуклона $(M >> m)$. При выполнении (1), когда движение виртуального мюона можно считать свободным, ПС наиболее важного основного уровня имеет вид

$$\delta E = -\frac{4\sqrt{2m}e^2}{\pi\hbar a_0^3}\int_0^\infty \frac{d\omega}{\sqrt{\omega}}\,\mathrm{Im}\,\alpha(\omega), \tag{2}$$

где $\alpha(\omega)$ – динамическая поляризуемость ядра.

Неравенство (1) выполняется лишь для легких ядер, сменяясь с ростом Z на обратное. Поэтому возникает необходимость обобщения формулы (2) на произвольные значения σ. Это и составляет цель данной статьи.

1. При условии $m^2e^2 < \mathbf{d}^2 > / \hbar^4 << 1$ слабости взаимодействия "заряд-диполь" $h = e\mathbf{d}\nabla\, {}^1/_r$ (и при очевидном условии $R << a_0$) ПС дается формулой

$$\delta E = < \overline{h(E + E' - H - H')^{-1} h} >. \tag{3}$$

Здесь черта – среднее по основному состоянию мюона $\int d\mathbf{r}\,\psi^* \ldots \psi$; $H = p^2/2m - Ze^2/r$, E, ψ – гамильтониан, энергия и волновая функция мюона; H', E' – гамильтониан и энергия движения внутри ядра, $\mathbf{d} = e\Sigma\vec{\rho}_i$ – его дипольный момент, $\vec{\rho}_i$ – координаты протона относительно центра масс ядра, скобки – среднее по его состоянию.

ПС можно выразить через функцию Грина мюона G

$$\delta E = \frac{e^2\hbar}{\pi}\int_0^\infty d\omega\,\mathrm{Im}\,\alpha(\omega)\,\Lambda(\omega),$$
$$\Lambda(\omega) = \int d\mathbf{r}d\mathbf{r}'\psi^*(\mathbf{r})\nabla\, {}^1/_r G(\mathbf{r},\mathbf{r}'\,|\,E-\omega)\nabla\, {}^1/_{r'}\psi(\mathbf{r}'), \tag{4}$$

где

$$G = (E - H)^{-1}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \quad \mathrm{Im}\,\alpha(\omega) = \frac{\pi}{3} < \mathbf{d}\delta(H' - E' - \omega)\mathbf{d} >.$$

Представление [5]

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}'\,|\,E) = -\frac{m\kappa}{\hbar^2\pi}\int_1^\infty \frac{dt\,t^{1/\kappa a_0}}{(t-1)^2}\exp\left[-\kappa(r+r')\frac{t+1}{t-1}\right] I_0\left(\frac{2\kappa\sqrt{2t(rr' + \mathbf{r}\mathbf{r}')}}{t-1}\right),$$

$$\kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar$$

ведет к выражению ($\xi = (1 + 2ma_0^2\,\omega/\hbar)^{1/2}$)

$$\Lambda(\omega) = \frac{8m}{\hbar^2 a_0^2 (\xi^2 - 1)} \left[\xi + 1 + 2\Phi_{-1/\xi} \left[\left(\frac{\xi - 1}{\xi + 1} \right)^2 \right] \right]. \qquad (5)$$

Функция $\Phi_\alpha(x)$ выражается через гипергеометрическую функцию

$$\Phi_\alpha(x) = \alpha^{-1} + x\Phi_{\alpha+1}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n/(n+\alpha) = \alpha^{-1} F(1, \alpha, \alpha+1, x) \quad (x < 1)$$

и имеет асимптотики

$$\Phi_\alpha(x) = \begin{cases} \alpha^{-1} + x/(\alpha+1) + x^2/(\alpha+2) + \dots & (x \ll 1) \\ -\ln(1-x) + C + \psi(\alpha) + \cdots & (1 - x \ll 1), \end{cases}$$

где ψ – логарифмическая производная Г- функции, С – постоянная Эйлера.

2. Переходим далее к атомным единицам $e = m = \hbar = 1$. При выполнении (1) в низшем по σ приближении из (4), (5) следует формула (2), а в следующем приближении –

$$\delta E = \frac{4Z^4}{\pi} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \operatorname{Im}\alpha(\omega) \ln\left(\frac{\omega}{8Z^2}\right). \qquad (6)$$

В частности, ПС мезоатома тяжелого водорода имеет вид (см. [2])

$$\delta E = -\frac{Z\sigma^{3/2}}{M} \left[\frac{16}{105\pi} + \frac{\sigma^{1/2}}{64} \ln\sigma + \dots \right], \qquad (7)$$

где $\sigma = 2Z^2/\epsilon$, ϵ – энергия связи дейтрона.

В обратном случае $\sigma \gg 1$ находим с учетом правил сумм [6].

$$\delta E = -2Z^2 \langle \mathbf{d}^2 \rangle /3 + Z/2M - \langle \Sigma\, \mathbf{p}_i \mathbf{p}_j \rangle /2M^2 Z^2 + \langle \Sigma\, \nabla_i \nabla_j U \rangle /2M^2 Z^2 + \dots, \quad (8)$$

где $\mathbf{p}$ – импульс протона, U – ядерный потенциал. Первый член (8) в совокупности с геометрическим сдвигом уровня $2Z^2 \langle \Sigma\, \vec{\rho}_i^{\,2} \rangle /3$, вызванным распределением заряда по ядру [6], дает

$$\delta E = Z^3(Z-1)\,\chi/3, \qquad (9)$$

где $\chi = \langle \Sigma\, (\vec{\rho}_i - \vec{\rho}_j)^2 \rangle / Z(Z-1)$ – средний квадрат расстояния между протонами.

Полученные выражения обобщаются на случай произвольного связанного состояния мюона $\psi(\mathbf{r})$ введением в них следующих факторов: $|\psi(0)|^2 \pi/Z^3$ в (2), (9) и первые члены (7), (8), $-\dfrac{\pi}{2Z^4} \dfrac{\partial |\psi|^2}{\partial r}\Big|_0$ в (6) и второй член (7), $\overline{1/r}/Z$ во второй 1 в третий и $Z^2\overline{r^2}/3$ в четвертый члены (8).

3. Уравнение Гейзенберга $\ddot{\mathbf{r}} = -[H[H\mathbf{r}]] = Z\nabla\, {}^1/_r$ позволяет выразить через величину $\Lambda(\omega)$ (5) динамическую поляризуемость водородоподобного атома (см. [6])

$$A(\omega) = \frac{2}{3} \overline{\mathbf{r}(H-E)[(H-E)^2 - \omega^2 - i\delta]^{-1}\mathbf{r}} = \frac{Z^2}{3\omega^4} \left[\Lambda(\omega) + \Lambda(-\omega - i\delta) - 3\omega^2/Z^2 - 4Z^2 \right].$$

Как и должно быть, $A(0) = {}^9/_{2Z^4}$ и $A \to -\omega^{-2}$ при $\omega \to \infty$, что соответствует известному высокочастотному пределу диэлектрической проницаемости атомарного газа концентрации N: $\epsilon(\omega) = 1 + 4\pi N A(\omega) = 1 - 4\pi N/\omega^2$.

Тот же способ ведет к обратному соотношению

$$\Lambda(\omega) = \frac{3}{\pi Z^2} \int_0^\infty \frac{d\omega' \omega'^4}{\omega' + \omega} \operatorname{Im} A(\omega').$$

Сравнение его и (4) с известным выражением для коэффициента ван-дер-ваальсовых сил между двумя комплексами с поляризуемостями α_1 и α_2

$$\frac{6}{\pi^2} \int_0^\infty \frac{d\omega d\omega'}{\omega' + \omega} \operatorname{Im} \alpha_1(\omega) \operatorname{Im} \alpha_2(\omega')$$

позволяет интерпретировать ПС уровня как результат взаимной поляризации двух подсистем – оболочки атома и ядра.

4. В заключение будет найден поляризационный потенциал V, который порождает ПС и дается формулой (3) без черты. Если мало возбуждение мюона $H - E$, то (3) ведет к обычному выражению[1)] $V_0 = - e^2 \alpha(0)/2r^4$. Если же, напротив, мало возбуждение ядра $H' - E'$, то тождество $\nabla \psi = (H - E)^{-1} \nabla \frac{Ze^2}{r} \psi$, справедливое для дискретного спектра, дает

$$V = \frac{\langle \mathbf{d}^2 \rangle}{3Zr^2} \frac{\partial}{\partial r}. \qquad (10)$$

С учетом равенства $\partial \psi / \partial r = - \psi / a_0$ при $r \ll a_0$ (10) переходит в найденное авторами [2] выражение $V_1 = - \langle \mathbf{d}^2 \rangle / (3Za_0 r^2)$. При $\sigma \ll 1$ оно действует при $R \ll r \ll \ll \sqrt{M/m}\, R$, сменяясь V_0 при бóльших r. Если же $\sigma \gg 1$, то $V = V_1$ при $R \ll r \ll \ll a_0$, $V = V_0$ при $r \gg MR^2/ma_0$, а в промежуточной области нужно пользоваться общим выражением (10). Это выражение справедливо и в релятивистском случае, когда энергия возбуждения ядра больше mc^2, (в частности, для электронного атома [4]). В этом случае потенциал (10) действует при $R \ll r \ll MR^2 c/\hbar$, сменяясь при бóльших r величиной V_0.

Литература

1. *Borie E., Rinker G.A.* Rev. Mod. Phys., 1982, **54**, 67.
2. *Киржниц Д.А., Пеньков Ф.М.* ЖЭТФ, 1983, **85**, 80; УФН, 1983, **141**, 552.
3. *Friar J.L.* Phys. Rev., 1977, **16C**, 1540.
4. *Bernabéu J., Ericson T.E.O.* Zsf. Phys., 1983, **309A**, 213.
5. *Hostler L.* J. Math. Phys., 1964, **5**, 591; *Мильштейн А.И., Страховенко В.М.* Препринт 82-34, ИЯФ СО АН СССР, Новосибирск, 1982.
6. *Бете Г., Солпитер Э.* Квантовая механика атома с одним и двумя электронами. М. : Физматгиз, 1960.

Физический институт им. П.Н.Лебедева
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
16 февраля 1984 г.

1) В этом разделе используются обычные единицы.