

Прецизионная спектроскопия H_2^+ и антипротонного гелия

Коробов В.И.

Объединенный институт ядерных исследований

141980, Дубна, Россия

korobov@theor.jinr.ru

ФФК-09, Дубна, Декабрь 1-4, 2009

Нерелятивистские уровни энергии

Основное состояние атома гелия

$$E_{\text{He}} = -2.90372\,43770\,341\,19\,59831\,11592\,45194\,40444\,66969\,25310\,5(5)$$

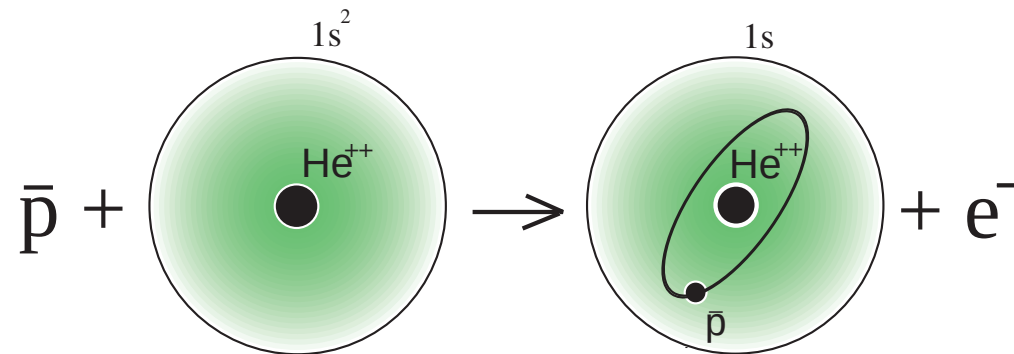
[C. Schwartz, arXiv:math-ph/0605018]

Основное состояние молекулярного иона водорода H_2^+

$$E_{\text{H}_2^+} = -0.59713\,90631\,23405\,07483\,41340\,96026(5)$$

[Hua Li, Jun Wu, Bing-Lu Zhou, Jiong-Ming Zhu, and Zong-Chao Yan, Phys. Rev. A **75**, 012504 (2007)]

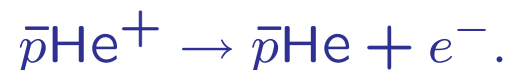
Использованные константы: $M_p = 1\,836.152\,701\,m_e$.

Антипротонный гелий.

Реакция образования атомов антипротонного гелия, $\bar{p}\text{He}^+$.

В 1964 году Кондо высказал гипотезу, по которой некоторая (малая) часть отрицательно заряженных массивных частиц, попадающих в мишень, заселяет околокруговые орбиты, (n, l) с $l \approx n - 1$.

В этом случае, для того чтобы передать энергию (≈ 25 эВ) необходимую для выбивания второго электрона из атома, антипротону необходимо значительно изменить свой угловой момент через переход высокой мультипольности. Благодаря этому такие состояния становятся устойчивы к Оже распадам



и единственным каналом в каскаде остается медленный радиационный распад ($\sim 1-3 \mu\text{s}$).

Сильное взаимодействие отсутствует.

Нерелятивистские уровни энергии. Атом антипротонного гелия

state	Δl	E_{nr}	$\Gamma/2$
(38,34)	3	$-2.836524596427(4)$	$1.626 \cdot 10^{-9}$
(37,33)	3	$-2.922449847(2)$	$5.09 \cdot 10^{-7}$
(36,33)	3	$-3.00797908793(2)$	$2.93 \cdot 10^{-9}$
(36,32)	2	$-3.019058205(5)$	$6.760 \cdot 10^{-6}$
(35,32)	3	$-3.1166797896(2)$	$6.97 \cdot 10^{-8}$
(34,32)	3	$-3.227676372722(3)$	$2.733 \cdot 10^{-9}$
(34,31)	2	$-3.238577980(1)$	$5.896 \cdot 10^{-6}$
(33,31)	3	$-3.36465178245(3)$	$1.453 \cdot 10^{-8}$
(32,31)	4	$-3.50763503077540(4)$	$5.1 \cdot 10^{-13}$
(31,30)	3	$-3.679774778770(4)$	$4.754 \cdot 10^{-9}$

Мультипольность Оже переходов Δl , нерелятивистские энергии E_{nr} (в а.е.), ширина Оже распада Γ (в а.е.) для долгоживущих состояний атома ${}^4\text{He}^+ \bar{p}$.

Ведущие релятивистские и радиационные поправки

Гамильтониан Брейта-Паули

Гамильтониан БП системы частиц спина 1/2 имеет вид ($\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$):

$$\begin{aligned}
 H_B &= -\frac{1}{c^2} \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^4}{8m_i^3} + U_B, \\
 U_B &= -\frac{e^2}{c^2} \sum_{i>j} \frac{Z_i Z_j}{2m_i m_j} \left(\frac{\mathbf{p}_i \mathbf{p}_j}{r_{ij}} + \frac{\mathbf{r}_{ij} (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{p}_i) \mathbf{p}_j}{r_{ij}^3} \right) - \frac{e^2}{c^2} \sum_{i>j} 4\pi \delta(\mathbf{r}_{ij}) Z_i Z_j \left(\frac{c_D^{(i)}}{8m_i^2} + \frac{c_D^{(j)}}{8m_j^2} \right) \\
 &\quad - \frac{e^2}{c^2} \sum_{j \neq i} \frac{Z_i Z_j c_S^{(j)} [\mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{p}_j] \mathbf{s}_j}{2m_j^2 r_{ij}^3} - \frac{e^2}{c^2} \sum_{i>j} \frac{Z_i Z_j \left(c_F^{(i)} [\mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{p}_j] \mathbf{s}_i - c_F^{(j)} [\mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{p}_i] \mathbf{s}_j \right)}{m_i m_j r_{ij}^3} \\
 &\quad + \sum_{i>j} \left\{ \left[\frac{\boldsymbol{\mu}_i \boldsymbol{\mu}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\boldsymbol{\mu}_i \mathbf{r}_{ij})(\boldsymbol{\mu}_j \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] - \frac{8\pi}{3} \boldsymbol{\mu}_i \boldsymbol{\mu}_j \delta(\mathbf{r}_{ij}) \right\}.
 \end{aligned}$$

Здесь $\boldsymbol{\mu}_i = (c_F^{(i)} Z_i / 2m_i c) \boldsymbol{\sigma}_i$ — оператор магнитного момента частицы.

Коэффициенты c_D , c_S и c_F определяются следующим образом:

$$c_D^{(i)} = F_1(0) + 8m_i^2 F_1'(0) + 2\kappa_i F_2(0) = 1 + 8m_i^2 \langle r^2 \rangle_E / 6,$$

$$c_S^{(i)} = 1 + 2\kappa_i,$$

$$c_F^{(i)} = 1 + \kappa_i,$$

где κ_i — аномальный магнитный момент частицы.

Конечные размеры частиц

Для частиц спина 1/2 из гамильтониана БП имеем вклад:

$$E_{\text{Darwin}} = \frac{\alpha^2 4\pi Z_i}{8M_i^2} \langle \delta(\mathbf{r}_i) \rangle.$$

В случае дейтрона (спин единица) этот вклад исчезает. Ведущий вклад от конечного распределения заряда частиц (как протона так и электрона) определяется выражением

$$E_{\text{nuc}} = \frac{2\pi Z_i (R_i/a_0)^2}{3} \langle \delta(\mathbf{r}_i) \rangle,$$

где R — среднеквадратичный (root-mean-square) радиус распределения электрического заряда в ядре. В расчетах мы использовали RMS радиусы протона: $R_p = 0.8750(68)$ fm, дейтрона: $R_d = 2.1394(28)$ fm, ядра гелия-3 $R_h = 1.9448(137)$ fm и гелия-4 $R_\alpha = 1.6757(26)$ fm*.

*I. Angeli, At. Data Nucl. Data Tables **87**, 185 (2004).

Радиационные поправки порядков $m\alpha^5$ и $m\alpha^5(m/M)$

Полный вклад в спин-независимую часть энергии порядков $m\alpha^5$ и $m\alpha^5(m/M)$ для одноэлектронной молекулы может быть представлен выражением:

$$\Delta E^{(3)} = \alpha^3 \sum_i \left[\frac{4Z_i}{3} \left(-\ln \alpha^2 - \beta(L, v) + \frac{5}{6} - \frac{3}{8} - \frac{1}{5} \right) \langle \delta(\mathbf{r}_i) \rangle + \frac{2Z_i^2}{3M_i} \left(-\ln \alpha - 4\beta(L, v) + \frac{31}{3} \right) \langle \delta(\mathbf{r}_i) \rangle - \frac{14Z_i^2}{3M_i} Q(r_i) \right],$$

где

$$\beta(L, v) = \frac{\langle \mathbf{J}(H_0 - E_0) \ln((H_0 - E_0)/R_\infty) \mathbf{J} \rangle}{\langle [\mathbf{J}, [H_0, \mathbf{J}]]/2 \rangle}$$

— нерелятивистский логарифм Бете. Здесь $\mathbf{J} = \sum_a z_a \mathbf{p}_a / m_a$ — оператор электрического тока системы частиц.

Оператор $Q(r)$ был введен Араки и Сачером

$$Q(r) = \lim_{\rho \rightarrow 0} \left\langle \frac{\Theta(r - \rho)}{4\pi r^3} + (\ln \rho + \gamma_E) \delta(\mathbf{r}) \right\rangle.$$

Знаменатель $\beta(L, v)$ может быть раскрыт следующим образом:

$$\langle 0 | [\mathbf{J}[H_0, \mathbf{J}]] / 2 | 0 \rangle = -4\pi \sum_{i>j} z_i z_j \left(\frac{z_i}{m_i} - \frac{z_j}{m_j} \right)^2 \langle \delta(\mathbf{r}_{ij}) \rangle.$$

Поправки КЭД высших порядков.

Релятивистские поправки порядка $m\alpha^6$.

Эффективный гамильтониан в порядке $m\alpha^6$ имеет вид:

$$H^{(6)} = \frac{p^6}{16m^5} + \frac{(\boldsymbol{\varepsilon}_1 + \boldsymbol{\varepsilon}_2)^2}{8m^3} - \frac{3\pi}{16m^4} \left\{ p^2 [\rho_1 + \rho_2] + [\rho_1 + \rho_2] p^2 \right\} \\ + \frac{5}{128m^4} (p^4 V + V p^4) - \frac{5}{64m^4} (p^2 V p^2).$$

Полный вклад в энергию в порядке $m\alpha^6$:

$$\Delta E^{(6)} = \underbrace{\langle H_B Q (E_0 - H_0)^{-1} Q H_B \rangle}_{\text{}} + \langle H^{(6)} \rangle$$

Нерелятивистский гамильтониан:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V, \quad V = -\frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}.$$

Гамильтониан взаимодействия Брейта-Паули:

$$H_B = -\frac{p^4}{8m^3} + \frac{\pi}{2m^2} [Z_1 \delta(\mathbf{r}_1) + Z_2 \delta(\mathbf{r}_2)] + \left(Z_1 \frac{[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}]}{2m^2 r_1^3} + Z_2 \frac{[\mathbf{r}_2 \times \mathbf{p}]}{2m^2 r_2^3} \right) s,$$

Выделение расходящихся членов

Мы применяем следующее преобразование к поправке второго порядка, определяемой взаимодействием Брейта-Паули:

$$\left\{ \begin{aligned} H'_B &= H_B + (H_0 - E_0)U + U(H_0 - E_0) \\ \langle H_B Q(E_0 - H_0)^{-1} Q H_B \rangle &= \\ &= \langle H'_B Q(E_0 - H_0)^{-1} Q H'_B \rangle \\ &\quad + \langle U H_B + H_B U \rangle - 2 \langle U \rangle \langle H_B \rangle + \langle U(H_0 - E_0)U \rangle \end{aligned} \right.$$

где $U = \frac{1}{4m}[Z_1/r_1 + Z_2/r_2] = -\frac{1}{4m}V$.

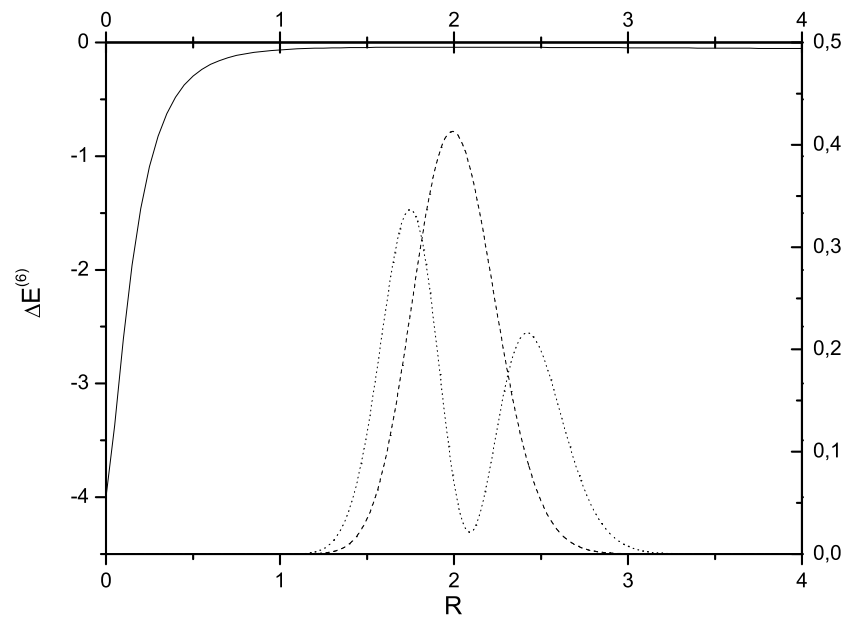
Используя тот факт, что Ψ_0 — решение уравнения Шредингера $H_0\Psi_0 = E_0\Psi_0$, получаем:

$$\begin{aligned} \langle H^{(6)} \rangle + \langle H'^{(6)} \rangle = & \frac{3E_0 \langle V^2 \rangle}{4m^2} - \frac{5E_0^2 \langle V \rangle}{4m^2} - \frac{3\pi E_0 \langle (\rho_1 + \rho_2) \rangle}{4m^3} \\ & + \frac{\langle \mathbf{p}V^2\mathbf{p} \rangle}{8m^3} + \frac{\langle V \rangle \langle H_B \rangle}{2m} + \frac{E_0^3}{2m^2} \end{aligned}$$

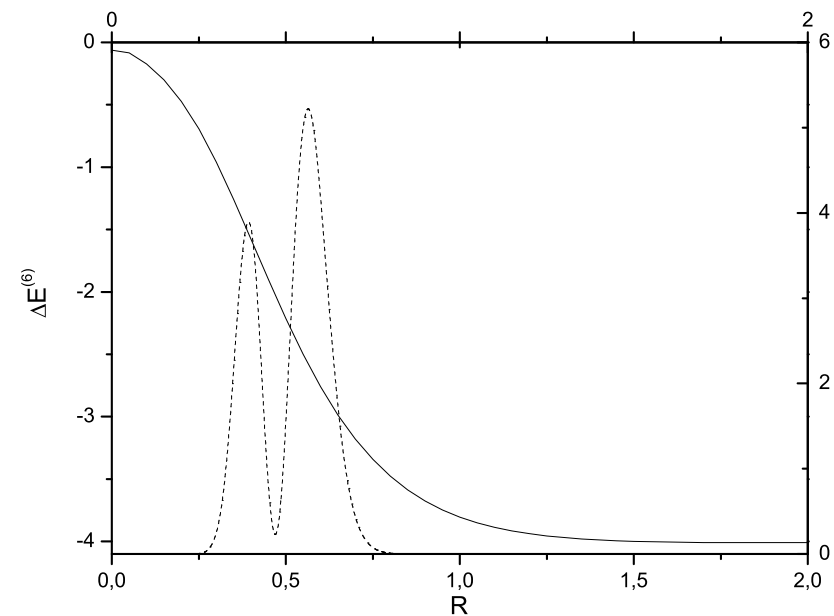
где $\rho_i = Z_i\delta(\mathbf{r}_i)$.

"Эффективные" потенциалы и волновые функции.

молекулярный ион H_2^+



антипротонный гелий



Радиационные поправки в пределе бесконечных ядер. Порядок $m\alpha^6$

Некоторые поправки высших порядков (радиационные поправки) в приближении *внешнего поля* известны в аналитическом виде [Sapirstein, Yennie, 1990]:

$$\begin{aligned}
 E_{se}^{(4)} &= \alpha^4 \frac{4\pi}{m_e^2} \left(\frac{139}{128} - \frac{1}{2} \ln 2 \right) \langle Z_1^2 \delta(\mathbf{r}_1) + Z_2^2 \delta(\mathbf{r}_2) \rangle, \\
 E_{anom}^{(4)} &= \alpha^2 \frac{\pi}{m_e^2} \left[\left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^2 \left(\frac{197}{144} + \frac{\pi^2}{12} - \frac{\pi^2}{2} \ln 2 + \frac{3}{4} \zeta(3) \right) \right] \langle Z_1 \delta(\mathbf{r}_1) + Z_2 \delta(\mathbf{r}_2) \rangle, \\
 E_{vp}^{(4)} &= \frac{4\alpha^3}{3m^2} \left[\frac{5\pi\alpha}{64} \right] \langle Z_1^2 \delta(\mathbf{r}_1) + Z_2^2 \delta(\mathbf{r}_2) \rangle, \\
 E_{2loop}^{(4)} &= \frac{\alpha^4}{m_e^2 \pi} \left[-\frac{6131}{1296} - \frac{49\pi^2}{108} + 2\pi^2 \ln 2 - 3\zeta(3) \right] \langle Z_1 \delta(\mathbf{r}_1) + Z_2 \delta(\mathbf{r}_2) \rangle.
 \end{aligned}$$

Последнее уравнение включает как вклад от дираковского форм-фактора так и вклад от поляризационного оператора.

Поправки отдачи порядка $m\alpha^6(m/M)$ малы и ими можно пренебречь.

Радиационные поправки в пределе бесконечных ядер. Порядок $m\alpha^7$

Волновая функция электрона с хорошей точностью может быть аппроксимирована $\psi_e(\mathbf{r}_e) = C[\psi_{1s}(\mathbf{r}_1) + \psi_{1s}(\mathbf{r}_2)]$, где ψ_{1s} — волновая функция основного состояния атома водорода. Таким образом, основной вклад в порядок $m\alpha^7$ может быть приближенно оценен как

$$E_{se}^{(5)} = \alpha^5 \sum_{i=1,2} \left\{ \frac{Z_i^3}{m_e^2} \left[-\ln^2 \frac{1}{(Z_i\alpha)^2} + A_{61} \ln \frac{1}{(Z_i\alpha)^2} + A_{60} \right] \langle \delta(\mathbf{r}_i) \rangle \right\},$$

$$E_{2loop}^{(5)} = \frac{\alpha^5}{\pi m_e^2} [B_{50}] \langle Z_1^2 \delta(\mathbf{r}_1) + Z_2^2 \delta(\mathbf{r}_2) \rangle,$$

где константы A_{61} , A_{60} , и B_{50} выбраны так, что они равны соответствующим константам для $1s$ состояния атома водорода $A_{61} = 5.419 \dots$ [Layzer, 1960], $A_{60} = -30.924 \dots$ [Pachucki, 1993], и $B_{50} = -21.556 \dots$ [Pachucki, 1994; Eides, Shelyuto, 1995].

Теоретическая погрешность в окончательных результатах оценивается как *суммарный вклад членов, зависящих от коэффициентов A и B .*

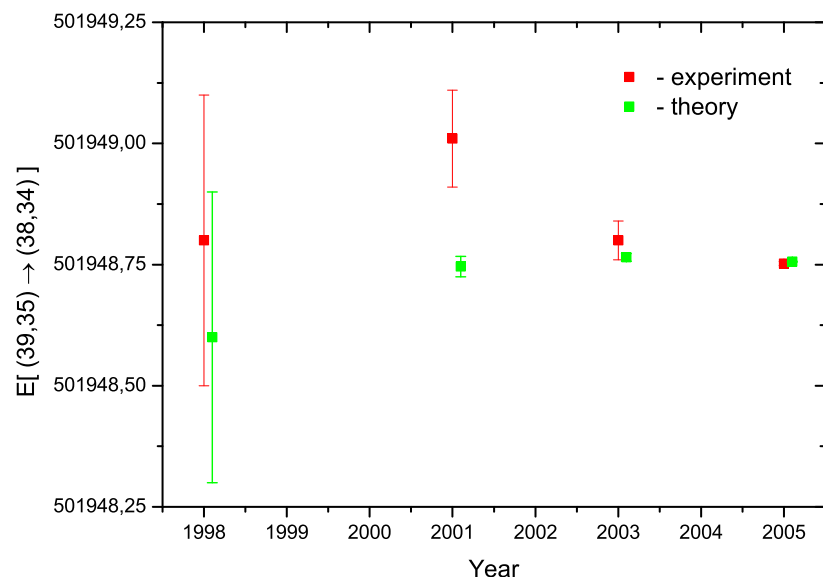
Молекулярный ион водорода

Вклады в энергию перехода $(0, 0) \rightarrow (0, 1)$

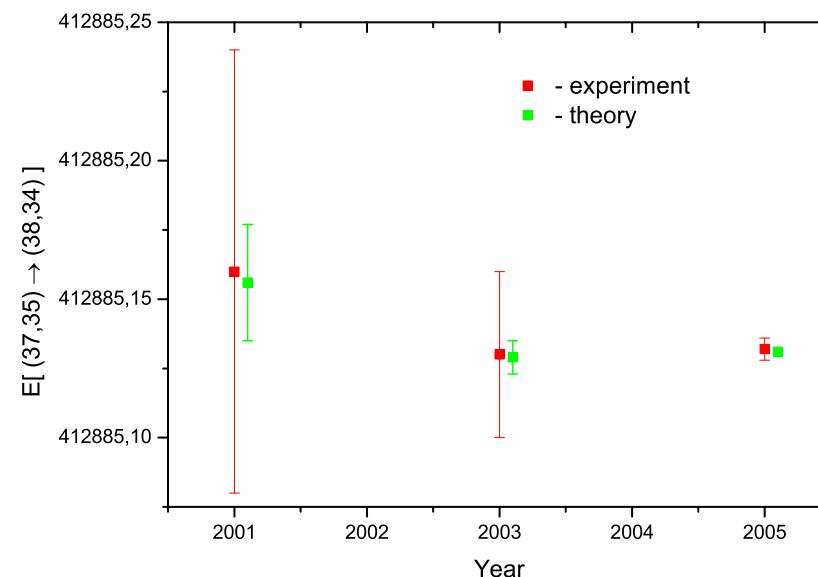
	H_2^+	HD^+
ΔE_{nr}	65 687 511.0686	57 349 439.9717
$\Delta E_{\alpha 4}$	1091.041(03)	958.152(03)
$\Delta E_{\alpha 5}$	-276.544(02)	-242.125(02)
$\Delta E_{\alpha 6}$	-1.997	-1.748
$\Delta E_{\alpha 7}$	0.120(23)	0.105(19)
ΔE_{tot}	65 688 323.688(25)	57 350 154.355(21)

Антипротонный гелий.

Прогресс в теории и эксперименте за последние годы



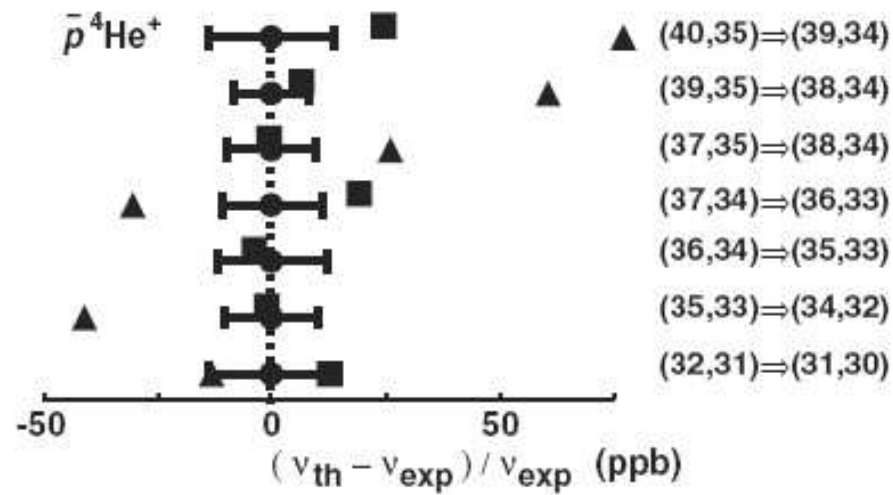
The (39, 35) → (38, 34) transition



The (37, 35) → (38, 34) transition

transition		theory
${}^4\text{He}^+ \bar{p}$	$(32, 31) \rightarrow (31, 30)$	1 132 609 223.5(0.8)(0.2)

Antiprotonic helium



The atomic mass deduced from comparison of theory and experiment [CODATA-06]:

$$A_r(e) = 0.000\,548\,579\,908\,81(91)[1.7 \times 10^{-9}]$$

Радиационные поправки в пределе бесконечных ядер. Порядок $m\alpha^7$ Приближение двух центров.

Вклад виртуальных фотонов малых импульсов описывается интегралом

$$\frac{e^2}{(2\pi)^3} \int_{|\mathbf{k}| < \epsilon} \frac{d^3k}{2k} \left(\delta_{ij} - \frac{k^i k^j}{k^2} \right) \left\langle \chi_0(\mathbf{r}) \left| e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \alpha^i (E_D - H_D - k)^{-1} \alpha^j e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \right| \chi_0(\mathbf{r}) \right\rangle$$

который может быть разбит на две части:

Нерелятивистский квадрупольный вклад

$$P_{nq}^{ij}(k) = \left\langle e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} p^i (E_0 - k - H_s)^{-1} p^j e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \right\rangle - \left\langle p^i (E_0 - k - H_s)^{-1} p^j \right\rangle$$

Релятивистская дипольная поправка

$$\Delta E_d = \frac{2\alpha}{3\pi} \int k dk \left\langle \chi_0 \left| \alpha^i [E_D - H_D - k]^{-1} \alpha^i \right| \chi_0 \right\rangle$$

Асимптотика при $k \rightarrow \infty$.

Обозначим

$$P_{nr}(k) = \left\langle \mathbf{p} \left(\frac{1}{E_0 - H - k} \right) \mathbf{p} \right\rangle = - \left\langle \nabla \left(\frac{1}{E_0 - H_s - k} \right) \nabla \right\rangle$$

Тогда используя приближенную функцию решения уравнения $(E_0 - H_s - k)\psi_1 = \nabla\psi_0$:

$$\psi_1(\mathbf{r}) = \frac{Z\mathbf{r}}{kr}\psi_0(r) - \frac{Z\mathbf{r}}{k^2r^3} \left[\psi_0(r) - e^{-\mu r} (1 + (\mu - Z)r) \psi_0(0) \right],$$

имеем ($k = w^2t$)

$$P_{nr}(k) = - \langle \psi_0 | \nabla | \psi_1 \rangle = \frac{1}{t} - \frac{2}{t^2} + \frac{4\sqrt{2}}{t^{5/2}} + \dots$$

мы получаем правильное разложение до $t^{-5/2}$, но не логарифмический член.

Более точная оценка дает

$$P_{nr}(k) = \frac{1}{k} \langle \nabla^2 \rangle - \frac{1}{k} \langle \psi_0 | [H, \nabla] | \psi_1 \rangle = \frac{1}{t} - \frac{2}{t^2} + \frac{4\sqrt{2}}{t^{5/2}} - \frac{4 \ln t}{t^3} + \dots$$

Но если мы используем стационарное вариационное выражение для P_{nr} , мы получим

$$\begin{aligned} P_{nr}(k) &= -2 \langle \psi_0 | \nabla | \psi_1 \rangle + \langle \psi_1 (E_0 - H - k)^{-1} \psi_1 \rangle \\ &= \frac{1}{t} - \frac{2}{t^2} + \frac{4\sqrt{2}}{t^{5/2}} - \frac{4 \ln t - 12 \ln 2 + 4}{t^3} + \dots \end{aligned}$$

которое позволяет получить правильно весь член порядка t^{-3} .