

Министерство образования и науки Российской Федерации

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра компьютерной физики и метаматериалов на
базе Саратовского филиала Института радиотехники
и электроники им. В.А. Котельникова РАН

**Эффекты отдачи и тонкий сдвиг уровней энергии водородоподобных
атомов**

АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

Студентки 2 курса 251 группы
направления 03.04.02 «Физика» физического факультета
Удаловой Анастасии Александровны

Научный руководитель
доцент, к.ф.-м.н.



С.В. Чурочкина

13.06.2017

Зав. кафедрой
профессор, д. ф.-м. н.



В.М. Аникин

13.06.2017

Саратов 2017 год

Введение

Актуальность темы

Исследование связанных состояний системы двух частиц принадлежат к тем фундаментальным научным направлениям, которые сохраняют актуальность на протяжении всего развития квантовой теории.

Существуют важные побудительные мотивы к расчету уровней энергии водородоподобных (ВП) атомов с возрастающей точностью.

Для прогресса фундаментальных исследований в физике элементарных частиц необходимы сведения о точных значениях важнейших физических констант – так называемых универсальных постоянных. Одним из важнейших критериев истинности новых моделей взаимодействий является использование в них установленных на настоящий момент параметров элементарных частиц – их массы, заряда и т.п.

Актуальность исследований спектров энергии водородоподобных (ВП) атомов определяется еще двумя обстоятельствами.

Задача двух тел, имеющая фундаментальное значение для описания процессов взаимодействия, полностью не решена в релятивистской механике и, как следствие, в теории квантовых полей.

Важнейший момент в выборе объекта исследований – возможность согласования результатов теории и эксперимента. ВП атом – простейшая замкнутая система двух частиц – наиболее доступен как теоретическому изучению, так и прецизионным измерениям параметров на практике.

Об актуальности темы, заявленной в выпускной квалификационной работе, свидетельствуют интенсивные экспериментальные и теоретические исследования уровней энергии водородоподобных атомов.

В последние годы стало ясно, что повышение точности измерений величин сдвигов уровней энергии водородоподобных атомов с помощью радиочастотных методов наталкивается на серьезные препятствия.

Новые перспективы уменьшения экспериментальных ошибок открывают методы бездоплеровской двухфотонной лазерной спектроскопии. Эти

эксперименты позволяют с рекордной точностью определить значение такой фундаментальной величины как постоянная Ридберга.

В настоящее время экспериментальное значение частоты $1S-2S$ перехода в атоме водорода [1] известно с точностью до десятка герц

$$\nu_{1S-2S} = 2\,466\,061\,413\,187\,035\ (10)\ \text{Гц}.$$

Полученное в эксперименте значение ν_{1S-2S} позволяет, в частности, с рекордной точностью определить значение такой фундаментальной величины, как постоянная Ридберга.

Прогресс, достигнутый в последних экспериментальных работах, стимулирует развитие теоретических методов по прецизионному определению поправок к известным значениям величины сдвигов уровней энергии.

Об актуальности данной работы также свидетельствует тот факт, что поправки к P -уровням, известны сейчас с большей точностью, чем поправки к S -уровням.

Целью данной работы является анализ предыдущих результатов и расчет новых вкладов в сдвиг $1S-2S$ уровней энергии ВП атомов, пропорциональных $\ln[m_2/m_1]$.

Для достижения этих целей решались следующие **задачи**:

- Анализ математического аппарата, используемого в исходных задачах на связанные состояния системы двух частиц в квазипотенциальном подходе.
- Исследование специфических эффектов отдачи в системе двух частиц с неравными массами.
- Анализ простейшего однофотонного обмена.
- Исследование влияния движения ядра на величину тонкого сдвига уровней энергии водородоподобного атома.

Краткая характеристика материалов исследования

Данная выпускная квалификационная работа посвящена теоретическому исследованию легких одноэлектронных атомов. Атомарный водород – одна из наиболее точно исследованных и наиболее понятных систем, используемых в исследованиях по физике. Спектроскопия атомарного водорода совместно с

вычислением его атомной структурой играют одну из ключевых ролей в современной физике.

Структура и объем ВКР

Выпускная квалификационная работа (магистерская работа) состоит из Введения, четырех разделов основного текста: 1 Зарождение задачи об уровнях энергии водородоподобных атомов; 2 Квазипотенциальный подход к задаче о связанных состояниях двух частиц; 3 Расчет лидирующего вклада пропорционального α^4 от обмена одним поперечным фотоном; 4 Анализ диаграммы параллельного обмена одним кулоновским и одним поперечным фотонами; Заключение; Списка использованных источников, состоящего из 19 наименований, и пяти приложений. Материалы работы изложены на 90 страницах.

Научная новизна работы

1. В рамках метода квазипотенциала в выпускной квалификационной работе была применена техника расчетов логарифмических по m_2/m_1 вкладов в тонкий сдвиг уровней энергии водородоподобных атомов.
2. Впервые вычислена логарифмическая по параметру $\beta = m_1/m_2$ поправка

$$\frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \ln \beta^{-1}.$$

Научная значимость работы

Работа носит теоретический характер. В рамках двухчастичного подхода к теории связанных состояний разработан и применен к исследованию эффектов отдачи математический аппарат, основанный на использовании квазипотенциала. Сравнение теории с новейшими экспериментальными данными спектроскопии сверхвысокого разрешения водородоподобных атомов позволит уточнить значение постоянной тонкой структуры и ряда других универсальных мировых констант.

Исследование спектров водородоподобных атомов одна из тех областей, где фундаментальные и прикладные вопросы переплетаются чрезвычайно

тесно. Так известно, что величина тонкого сдвига уровней энергии зависит от фундаментальной физической константы – постоянной Ридберга.

В свою очередь эта постоянная дает сведения о константе электромагнитного действия. Выбор теоретических моделей электрослабых и сильных взаимодействий во многом определяется значением константы электромагнитного взаимодействия.

Ожидаемые результаты важны и для практических приложений, например в метрологии.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Существование логарифмических по параметру отношения масс частиц вкладов в тонкий сдвиг S -уровней энергии от диаграммы параллельного обмена одним кулоновским и одним поперечным фотонами.
2. Численные оценки обнаруженных логарифмических вкладов и сравнение полученных величин сдвигов с последними данными теории и эксперимента.

Основное содержание работы

Во введении обоснована актуальность выбранной темы выпускной квалификационной работы, ее новизна, определена цель работы.

В разделе 1 рассмотрены различные подходы к исследованию уровней энергии слабо связанных систем.

В 1925 году Дж. Уленбек и С. Гаудсмит выдвинули гипотезу, приписывающую электрону собственный момент количества движения s , создающий соответствующий магнитный момент, который впоследствии был назван спином. В 1928 году П. Дирак сформулировал принципы релятивистской квантовой механики, которые позволили интерпретировать тонкую структуру атома водорода как результат взаимодействия спина электрона s и его орбитального момента l .

Обнаружение тонкой структуры спектра атома водорода привело к разработке Дираком его релятивистской модели и записи уравнения, которое

представляет собой линеаризацию обобщенного релятивистского уравнения Шредингера, инвариантного по отношению к преобразованиям Лоренца. Формально, уравнение Дирака имеет схожий вид с уравнением Шредингера, однако волновая функция Ψ представляет собой биспинор $\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$, компоненты которого удовлетворяют системе уравнений

$$\begin{aligned} (E - m_e - V)\varphi &= \vec{\sigma}\hat{p}\chi \\ (E + m_e - V)\chi &= \vec{\sigma}\hat{p}\varphi, \end{aligned} \quad (1)$$

где \hat{p} - оператор импульса, $\vec{\sigma}$ - матрицы Паули, а, $V = -Ze^2/r$ - кулоновский потенциал [2]. Дирак показал, что для свободного электрона, обладающего определённым значением импульса \hat{p} , уравнение (1) имеет четыре линейно независимых решения: два решения с положительной энергией $E_p = \sqrt{\vec{p}^2 + m_e^2}$ и два - с отрицательной $E_p = -E_p$. Решения с отрицательной энергией вызвали большую трудность в их интерпретации. Дирак ввёл предположение, что все уровни с отрицательной энергией заполнены, и при вырывании одного состояния образуется так называемая «дырка». Масса частицы, описываемой этим состоянием, равна массе электрона, а её заряд должен быть противоположен заряду электрона.

В 1932 г. К. Андерсеном был открыт позитрон, существование которого было предсказано дираковской теорией.

Важным следствием дираковской теории было также то, что как для электрона, так и для позитрона волновая функция оказалась состоящей из двух различных компонентов. Существование этих компонентов было интерпретировано как наличие у электрона собственного постоянного магнитного момента

$$\mu_e = g_e \frac{e\hbar}{2m_e c} s, \quad (2)$$

где $\mu_B = e\hbar/2m_e c$ - магнетон Бора, s - спиновое число электрона, g_e - безразмерное приведенное гиромагнитное отношение [3]. Наличие спина электрона, который может принимать разные значения проекции на

орбитальный момент, приводит к возникновению потенциала спин-орбитального взаимодействия и расщеплению уровней нерелятивистской структуры. Для кулоновского потенциала и $M \rightarrow \infty$ уравнение Дирака имеет точное решение, а соответствующие уровни энергии в атоме могут быть представлены как (используется система единиц $c = \hbar = 1$):

$$E_{Dirac}(n, j) = m_e f(n, j),$$

$$f(n, j) = \left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n - (j+1/2) + \sqrt{(j+1/2)^2 - (Z\alpha)^2}} \right)^2 \right]^{-1/2} \approx 1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) + O((Z\alpha)^6), \quad (3)$$

учитывая, что для лёгких систем $Z\alpha \ll 1$. Квантовое число j есть сумма орбитального числа l и спинового числа s . Как следует из решения уравнения Дирака, энергия уровня зависит теперь не только от главного квантового числа, но и от полного момента j , который для одного и того же n может принимать различные значения. Ведущим членом, представляющим тонкое расщепление уровней водородоподобного атома, является член со степенью $(Z\alpha)^4$ в разложении (3). Появление только чётных степеней $Z\alpha$ следует из разложения зависимости энергии свободного электрона от импульса $\sqrt{\vec{p}^2 + m_e^2}$ по степеням \vec{p}^2/m_e^2 :

$$\sqrt{\vec{p}^2 + m_e^2} \approx m_e + \frac{\vec{p}^2}{2m_e} + \frac{\vec{p}^4}{8m_e^3} + O\left(\frac{\vec{p}^6}{m_e^5}\right), \quad (4)$$

где характерное значение квадрата импульса для стационарных уровней в кулоновском поле равно $\langle n | \vec{p}^2 | n \rangle = m_e^2 (Z\alpha)^2 / n^2$. Таким образом, поправки, имеющие вид чётных степеней разложения по $Z\alpha$ и не содержащие других степеней α или m_e/m_p являются релятивистскими поправками, возникающими при разложении по степеням $(v/c)^2$.

Необходимо подчеркнуть, что решение уравнение Дирака не содержит членов, описывающих сверхтонкую структуру, а также радиационных поправок, поправок отдачи и поправок, связанных с неэлектромагнитными взаимодействиями. В отличие от уравнения Шредингера, в котором учет конечной массы ядра (и, соответственно, нерадиационных поправок отдачи)

приводит к простой замене массы электрона m_e , на приведенную массу μ с сохранением аналитичности решения, уравнение Дирака такой замены не допускает.

В разделе 2 описан квазипотенциальный подход, который является наиболее эффективным для расчетов уровней энергии водородоподобных атомов.

Как известно, структура уровней энергии водородоподобных атомов характеризуется тремя малыми параметрами: постоянной тонкой структуры α , связанной с зарядом электрона, величиной заряда Z тяжелой частицы, характеризуемой параметром $Z\alpha$, и массовым коэффициентом m_1/m_2 . Наибольший интерес вызывают поправки на отдачу, зависящие от параметров $Z\alpha$ и m_1/m_2 .

В обзоре [4] было отмечено, что первые поправки на отдачу ΔE , пропорциональные $(Z\alpha)^5 m_1^2/m_2$, генерируются ядром двухфотонных взаимодействий. Аргументация этого утверждения восходит к работам [5, 6] по применению двухчастичного релятивистского формализма к описанию связанных состояний. Полученный в этих работах результат от обмена двумя поперечными фотонами был впоследствии подтвержден в статьях [7, 8]

$$\Delta E = \frac{1}{\pi} \frac{(Z\alpha)^5 \mu^3}{m_1 m_2} \frac{1}{n^3} \left\{ \frac{2}{3} \delta_{l0} \ln \alpha^{-1} - \frac{8}{3} \ln[k_0(n)] - \frac{1}{9} \delta_{l0} - \frac{7}{3} a_n + \right. \\ \left. + \frac{2}{m_2^2 - m_1^2} \delta_{l0} \left(m_1^2 \ln \frac{m_2}{\mu} - m_2^2 \ln \frac{m_1}{\mu} \right) \right\}. \quad (5)$$

Отметим наличие в выражении (5) весьма высокого по порядку величины логарифмического по отношению масс частиц вклада, пропорционального

$$m_1^2 \ln \frac{m_2}{\mu} - m_2^2 \ln \frac{m_1}{\mu}.$$

$$\Delta E^B = \frac{(Z\alpha)^5 \mu^3}{\pi m_1 m_2} \frac{1}{n^3} \frac{2}{m_2^2 - m_1^2} \left[m_1^2 \ln \frac{m_2}{\mu} - m_2^2 \ln \frac{m_1}{\mu} \right] = \quad (6)$$

$$= \frac{2(Z\alpha)^5 \mu^3}{\pi m_1 m_2} \frac{1}{n^3} \frac{1}{1-\beta^2} \left[\beta^2 \ln \frac{1+\beta}{\beta} - \ln(1+\beta) \right] \sim \frac{2(Z\alpha)^5 \mu^3}{\pi m_1 m_2} \frac{1}{n^3} \beta^2 \ln \beta^{-1},$$

где $\beta = m_1/m_2$.

Иного логарифмического по массовому коэффициенту β вклада в тонкий сдвиг уровней энергии от других обменов во всех перечисленных работах обнаружено не было.

Все перечисленные в (6) поправки, в том числе логарифмический по массовому коэффициенту β член, получены с помощью разложений типа

$$\sqrt{p^2 + m_i^2} \approx m_i + \frac{p^2}{2m_i} + \dots, \quad (7)$$

Однако существуют и релятивистские эффекты отдачи, которые не могут быть описаны при разложениях типа (7) [9].

В разделе 3 представлен расчет с использованием квазипотенциального подхода лидирующего вклада пропорционального α^4 от обмена одним поперечным фотоном:

$$\Delta E_T = -\frac{\alpha^4 \mu^3}{m_1 m_2}. \quad (8)$$

В данной поправке нет искомого нами вклада пропорционального $\frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \ln \beta^{-1}$, поэтому перейдем к двухфотонной диаграмме.

В разделе 4 рассматривается фейнмановская диаграмма с параллельными фотонными линиями, отвечающая обмену одним кулоновским и поперечным фотонами. Рассчитывается аналитическое выражение для расчета поправок к тонкому сдвигу S -уровней энергии квазипотенциальным подходом.

Получено конечное выражение для поправки к уровням энергии, отвечающее за тонкий сдвиг от диаграммы параллельного обмена одним кулоновским и одним поперечным фотонами.

Из этого выражения только два слагаемых дают нужный нам вклад.

$$\Delta E_{\vec{k} \frac{M_{1k}}{M_{1q}}} = -\frac{64\alpha^7 \mu^5}{(2\pi)^6} \int \frac{d^3 p \Omega_p N_p}{(p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 q \Omega_q N_q}{(q^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \times$$

$$\begin{aligned} & \times \int \frac{d^3 k}{\varepsilon_{1k} \varepsilon_{2k} k_p^2 k_q^2 (\varepsilon_{1k} - E_1 + \varepsilon_{2k} - E_2)} (\vec{k} \vec{q}) \frac{M_{1k}}{M_{2q}} = \\ & = \frac{2}{\pi^2} (\ln(1 + \sqrt{2}) - \sqrt{2}) \frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \ln \beta^{-1}. \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_{\vec{k} \vec{q} \frac{M_{2k}}{M_{1q}}}^{(\vec{k} - \vec{q})^4} &= \frac{32 \alpha^7 \mu^5}{\pi (2\pi)^5} \int \frac{d^3 p \Omega_p N_p}{(p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 q \Omega_q N_q}{(q^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \times \\ & \times \int \frac{d^3 k}{k_p^2 \varepsilon_{1k} \varepsilon_{2k} (\varepsilon_{1k} - E_1 + \varepsilon_{2k} - E_2) k_q^2 (\varepsilon_{1k} + \varepsilon_{1q}) (\varepsilon_{2k} + \varepsilon_{2q})} \frac{1}{M_{1q}} \frac{M_{2k}}{M_{1q}} (\vec{k} \vec{q}) \times \\ & \times \frac{(\vec{k} - \vec{q})^2}{k_q^2} = \frac{2}{\pi^2} \left[(\ln(1 + \sqrt{2}) - \sqrt{2}) + \frac{5\pi}{32} \right] \frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \ln \beta^{-1}. \end{aligned} \quad (10)$$

Результирующая поправка от диаграммы параллельного обмена одним кулоновским и одним поперечным фотонами равна

$$\Delta E_{\alpha^6 \ln \beta^{-1}} = \left(\frac{4}{\pi^2} (\ln(1 + \sqrt{2}) - \sqrt{2}) + \frac{5}{16\pi} \right) \frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \ln \beta^{-1}. \quad (11)$$

Численные значения найденной поправки для атомов мюония и водорода равны:

$$\Delta E_{\mu} = -55\,188 \text{ Гц}, \quad (12)$$

$$\Delta E_H = -8\,874 \text{ Гц}. \quad (13)$$

В заключении выпускной квалификационной работы перечислены основные результаты и выводы.

В приложениях вычислена матричная структура; рассчитаны интегралы с помощью теории вычетов; записано решение тройных интегралов и оценка порядка величин.

Основные результаты, полученные при работе над выпускной квалификационной работой

Дан обзор литературы по исследованию взаимодействий двухчастичных квантовых релятивистских систем и приведены современные теоретические и экспериментальные данные о тонком сдвиге уровней энергии в атоме водорода.

При исследовании вклада эффектов отдачи в тонкий сдвиг уровней

энергии от взаимодействия частиц с различными массами посредством обмена одним поперечным и одним кулоновским фотонами было получено аналитическое выражение для соответствующей поправки к $1S$ - уровню энергии.

В этом выражении были выполнены оценки вкладов различных порядков по параметрам α и β до интегрирования трёхмерных выражений. Был вычислен вклад в тонкий сдвиг $1S$ - уровней энергии пропорциональный $\frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \ln \beta^{-1}$.

Список использованных источников

- 1 Matveev, A. Precision Measurement of the Hydrogen $1S$ - $2S$ Frequency via a 920-km Fiber Link / A. Matveev, C. G. Parthey, K. Predehl, et al. // Phys. Rev. Lett. 2013. Vol. 110, No. 23. P. 230801-1–203801-5.
- 2 Берестецкий, В.Б. Квантовая электродинамика / В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. М. :Физматлит, 2002. 720 с.
- 3 Циксон, К. Квантовая теория поля. В 2 т. Т. 1 /К. Циксон, Ж.-Б. Зюбер; пер.с англ. под ред. М. Р. Мир-Касимова. М. :Мир, 1984. 448 с.
- 4 Eides, M. I. Theory of light hydrogenlike atoms / M. I. Eides, H. Grotch, V. A. Shelyuto // Phys. Rep. 2001. Vol. 342, No. 2. P. 63-261.
- 5 Salpeter, E. E. Mass Corrections to the Fine Structure of Hydrogen-Like Atoms / E. E. Salpeter // Phys. Rev. 1952. Vol.87, No. 2. P. 328–343.
- 6 Fulton, T. Two-body system in quantum electrodynamics. Energy levels of positronium / T. Fulton, P. C. Martin // Phys.Rev. 1954. Vol. 95, No. 3. P. 811-822
- 7 Grotch, H. Effective potential model for calculating nuclear corrections to the energy levels of hydrogen /Grotch, D. R. Yennie//Rev.Mod.Phys. 1969. Vol. 41, No. 2. P. 350-374.
- 8 Нюнько, Н. Е. Влияние движения ядра на тонкую структуру водорода / Н. Е. Нюнько, Ю. Н. Тюхтяев, Р. Н. Фаустов //Сообщение – P2-7493. Дубна: ОИЯИ. 1973. 16 с.

9 Чурочкина, С. В. О проблеме сходимости ряда теории возмущений в квазипотенциальном методе / С. В. Чурочкина // Гетеромагнитная микроэлектроника: сб. науч. тр.; под ред. проф. А. В. Ляшенко. Саратов: Изд-во Сарат. ун-та. 2014. С. 23 – 36.