УДК 530.145.7,539.182

А. И. ЛАВРЕНОВ, Е. Е. ТРОФИМЕНКО

О ПРИМЕНЕНИИ МЕТОДА ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЛАПЛАСА К ВОЗМУЩЕННОМУ УРАВНЕНИЮ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ 1s-СОСТОЯНИЯ ВОДОРОДОПОДОБНОГО АТОМА

Одним из наиболее плодотворных аналитических методов теории возмущений (ТВ) является метод, основанный на применении преобразования Лапласа к возмущенному уравнению Шредингера. Однако из-за трудностей, возникающих при выполнении обратного преобразования Лапласа для поправочной волновой функции (ВФ), его использование ограничивается случаем, когда радиальная часть оператора возмущения имеет степенной вид [1]. В работе предлагается метод нахождения оригинала поправки к ВФ водородоподобного (ВП) атома. Для простоты рассмотрено возмущение основного состояния ВП атома сферически-симметричным потенциалом $W(r)$. Обобщение получаемых при этом результатов на потенциалы иной мультипольности не вызывает затруднений. Так, в работе [2] одним из авторов рассмотрен случай, когда $W(r) = f(r) P_2(\cos \Theta)$. Уравнение для ВФ первого порядка ТВ имеет вид:

$$[E_0 - H_0] \Psi_1 = [W - E_1] \Psi_0, \tag{1}$$

где H_0 — гамильтониан невозмущенного атома для 1s состояния; Ψ_0, Ψ_1 и E_0, E_1 — ВФ и энергии 1s состояния соответственно в нулевом и первом порядке ТВ.

Выбирая Ψ_1 следующим образом:

$$\Psi_1 = \Psi_0 u(r)/r, \tag{2}$$

получаем:

$$ru''(r) - \frac{2Z}{a_0} ru'(r) + \frac{2Z}{a_0} u(r) = 2m(W - E_1) r^2. \tag{3}$$

Используя свойства преобразования Лапласа и для удобства записи полагая

$$\bar{u}(p) = \int_0^\infty e^{-pt} u(t)\, dt \qquad \bar{W}(p) = \int_0^\infty e^{-pt} t^2 W(t)\, dt \tag{4}$$

и $\beta = 2Z/a_0$, будем иметь

$$p(\beta - p)\bar{u}' - 2\bar{u}(\beta - p) = \frac{2m[\bar{W}(p)p^3 - \bar{W}(\beta)\beta^3]}{p^3}. \tag{5}$$

Здесь учтено, что $E_1 = \langle \Psi_0 / W / \Psi_1 \rangle = \beta^3 \bar{W}(\beta)/2$.

Общее решение дифференциального уравнения (ДУ) (5) можно записать в виде:

$$\bar{u}(p) = \frac{\bar{N}}{p^2} - \frac{2m}{p^2}\int_\beta^p ds\, \frac{\bar{W}(s)s^3 - \bar{W}(\beta)\beta^3}{(s-\beta)s^2}, \tag{6}$$

где первый член — решение однородного ДУ (5), второй — частное решение, а константа $\bar{N}$ легко определяется из условия ортогональности $\langle \Psi_1/\Psi_0 \rangle = 0$ и равна $\bar{N} = -m[3\beta\bar{W}(\beta) + \beta^2\bar{W}'(\beta)]$. Если подынтегральное выражение в (6) преобразовать следующим образом:

$$\frac{\bar{W}(s)s^3 - \bar{W}(\beta)\beta^3}{(s-\beta)s^2} = \frac{\bar{W}(s)s^3 - \bar{W}(\beta)s^3 + \bar{W}(\beta)s^3 - \bar{W}(\beta)\beta^3}{(s-\beta)s^2} =$$

$$= s\frac{\bar{W}(s) - \bar{W}(\beta)}{s-\beta} + \bar{W}(\beta)\left[1 + \frac{\beta}{s} + \frac{\beta^2}{s^2}\right]$$

и выполнить интегрирование по s, то лапласовский образ $u(r)$ примет вид:

$$\bar{u}(p) = -2m\left\{\frac{5\beta\bar{W}(\beta) + \beta^2\bar{W}'(\beta)}{2p^2} + \beta\bar{W}(\beta)\frac{\ln\left(\frac{p}{\beta}\right)}{p^2} + \int_0^\infty W(t)\,t \times\right.$$

$$\times \frac{e^{-\beta t} - e^{-pt}}{p^2}dt + \frac{\beta}{p^2}\int_0^\infty W(t)\,t^2 e^{-\beta t}\,[Ei(t\beta - tp) - \ln[t(p-\beta)] - \gamma]\,dt -$$

$$\left. - \frac{\bar{W}(\beta)\beta^2}{p^3}\right\}. \tag{7}$$

Здесь $E_i(z)$ — интегральная показательная функция; γ — постоянная Эйлера.

На основании теоремы об интегрировании изображения и оригинала по параметру $u(r)$ получим, выписывая последовательно оригиналы изображений в формуле (7). В результате после громоздких преобразований можно придти к следующему выражению для $\psi_1(r)$:

$$\Psi_1(r) = \int_0^\infty \left[2m\beta e^{-\frac{\beta t + \beta r}{2}}\left\{\ln(\beta t) + \ln(\beta r) + \frac{\beta r + \beta t}{2} + 2\gamma - \frac{1}{\beta r} - \frac{1}{\beta t} -\right.\right.$$

$$\left.\left. - \frac{7}{2} + \frac{e^{\beta x_<}}{\beta x_<} - \mathrm{Ei}(\beta x_<)\right\}\right] W(t)\,t^2\,\Psi_0(t)\,dt, \tag{8}$$

где $x_<$ — меньшее из r и t.

Формула (8) по своей форме полностью совпадает с выражением для $\Psi_1(r)$, записанным с помощью редуцированной кулоновской функции

Грина (РКФГ) [3]. Множитель в квадратных скобках, стоящий в подынтегральном выражении формулы (8), равен s-компоненте РКФГ $1s$-состояния ВП атома. Очевидно, что метод преобразования Лапласа может оказаться чрезвычайно плодотворным для нахождения РКФГ.

По существу проведенное исследование позволяет проследить взаимосвязь и показывает эквивалентность метода преобразования Лапласа и метода РКФГ в стационарной ТВ. Каким из них пользоваться, во многом зависит от специфики конкретной задачи.

В качестве конкретного примера применения лапласовского образа поправочной функции $\bar{u}(p)$ рассмотрим влияние конечных размеров ядра на величину магнитного момента связного лептона в легких атомах. Согласно работе [4], g-фактор лептона в связном $1s$-состоянии выражается через среднее значение квадрата импульса $\langle\Psi/\vec{p}^2/\Psi\rangle$. Представим потенциал взаимодействия лептона с ядром $V(r)$ в виде суммы двух слагаемых $V=-\frac{\alpha Z}{r}+W$, первое из которых представляет собой кулоновский потенциал, а второе — возмущение, обусловленное учетом размеров ядра. Можно легко показать, что с точностью до членов первого порядка малости по W величина $\langle\Psi/\vec{p}^2/\Psi\rangle$ равна:

$$\langle\Psi/\vec{p}^2/\Psi\rangle = \langle\Psi_0/\vec{p}^2/\Psi_0\rangle + 2\,\langle\Psi_0/\frac{\alpha Z}{r}/\Psi_1\rangle \tag{9}$$

С помощью формул (2), (4) находим, что

$$2\,\langle\Psi_0/\frac{\alpha Z}{r}/\Psi_1\rangle = -\alpha Z_m\,[3\beta^2\,\overline{W}(\beta) + \beta^3\,\overline{W}'(\beta)]. \tag{10}$$

Учитывая (9), (10) и результат работы [4], получим, что g — фактор лептона в связном $1s$-состоянии с учетом конечных размеров ядра определится формулой

$$g(1s) = g_0\Big\{1 - \frac{(\alpha Z)^2}{3}\Big[1 - \frac{3}{2}(m/M) + \frac{3}{2}(m/M)^2(Z+1) - 4\Big(\frac{Z\,\langle r^2\rangle^{1/2}}{a_0}\Big)^2\Big] + \frac{\alpha(\alpha Z)^2}{4\pi}\Big[1 - \frac{5}{3}(m/M) + \frac{6+Z}{3}(m/M)^2\Big]\Big\}. \tag{11}$$

где m, M — массы лептона и ядра соответственно; g_0—g-фактор свободного лептона; $\langle r^2\rangle^{1/2}$ — среднеквадратический радиус ядра.

Полученная в работе поправка на конечные размеры ядра порядка $(\alpha Z)^2\Big[\frac{Z\,\langle r^2\rangle^{1/2}}{a_0}\Big]^2$ для атома водорода по величине сравнима с рассчитанной ранее поправкой порядка $\alpha(\alpha z)^2(m/M)^2$ [4], обусловленной радиационными эффектами и эффектами отдачи ядра. Для мюонных атомов вычисленная поправка играет более существенную роль, чем для электронных. Поэтому ранее расчет g-фактора мюона в связном $1s$-состоянии проводился численно [5], в то время как формула (11) имеет простой аналитический вид. В ней член с $(\alpha Z)^2$ определяет поправку на связность лептона в атоме. Искомая поправка учитывает эффект конечных размеров ядра. Для сравнения аналитического и численного расчетов приведем следующие цифры. Поправка на связность, согласно (11) и [5], соответственно: для $Z=8$—0,001099 и 0,001104, для $Z=12$—0,002363 и 0,002379. Как видно, расхождение составляет не более 1 %.

В заключение отметим, что поскольку сферически-симметричный потенциал не смешивает ВФ нулевого приближения, то метод преобразования Лапласа может быть легко обобщен на возбужденные ns-состояния. Поправки к ВФ ns-состояний ВП атомов за счет сферически-симметричного потенциала возмущения могут быть также представлены в квадратурах [6]. Преимущество выражений (6), (7) по сравнению с формулами в квадратурах заключается в простоте расстановки пределов интегрирования.

ЛИТЕРАТУРА

1. Маханек А. Г., Корольков В. С. Аналитические методы в квантомеханической теории возмущений.— Минск, 1982, с. 88.
2. Трофименко Е. Е.— Программа и тез. докл. Всесоюзной конференции по теории атомов и атомных спектров. Минск, 27—29 сентября 1983. Минск, 1983, с. 11.
3. Laurenzi B. J. et all.— Int. J. Quant. Chem.. 1977, v. 11, № 5, p. 869.
4. Фаустов Р. Н.— ЭЧАЯ, 1972, т. 3, № 1, с. 238.
5. Ford K. W. et all.— Phys. Rev., 1963, v. 129, p. 194.
6. Hirschfelder J. O. et all.— Adv. Quant. Chem., 1964, v. 1, p. 255.