СВЕРХТОНКАЯ СТРУКТУРА ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ВОДОРОДОПОДОБНЫХ АТОМОВ С УЧЁТОМ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПО ОБЪЁМУ МУЛЬТИПОЛЬНЫХ МОМЕНТОВ ЯДРА

А.Н.Лавренов
Институт прикладных физических проблем им. А.Н.Севченко, г.Минск

Сверхтонкое расщепление (СТР) атомов, обусловленное мультипольными моментами ядер (ММЯ), обычно находят с помощью теории возмущений (ТВ). Как известно, в первом порядке ТВ СТР не имеет место для ns- состояний [1], а во втором - для точечного ядра получается расходящийся результат [2]. Поэтому, в данной работе рассматривается аналитическое решение задачи влияния ММЯ с учетом их пространственного распределения по объему на величину энергии СТР основного уровня легких водородоподобных атомов.

Взаимодействие, обусловленное ММЯ, представим в виде [3]:

$$H_\ell = -\frac{\alpha}{2} Q_\ell f(r) P_\ell(\cos\theta), \qquad (1)$$

где θ - угол между радиус-вектором лептона и осью симметрии ядра. Здесь и в дальнейшем моделью ядра будет служить жесткий деформированный ротатор, симметричный относительно некоторой оси. Функция $f(r)$ в общем случае определяется выражением

$$f(r) = \frac{1}{r^{\ell+1}}\left[1 - \frac{2}{Q_\ell}\sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}}\int\limits_r^\infty d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x})\,Y_{\ell 0}(\vec{n})\,\frac{x^{2\ell+1} - r^{2\ell+1}}{x^{\ell+1}}\right], \qquad (2)$$

где

$$Q_\ell = 2\sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}}\int d^3\vec{x}\,\rho(\vec{x})\,Y_{\ell 0}(\vec{n})\,x^\ell \; - \qquad (3)$$

внутренний ММЯ.

Используя преобразование Лапласа (ПЛ) к возмущенному уравнению Шредингера при наличии потенциала возмущения H_ℓ (1), найдем волновую функцию (ВФ) водородоподобных атомов в первом порядке ТВ Ψ_1. Для этого выберем радиальную часть Ψ_1 в следующем виде:

$$R_1(r) = N_0 e^{-\frac{\beta r}{2}} r^{-\ell-1} u_1(r), \tag{4}$$

где N_0 – нормировочная константа, $\beta = \frac{2Z}{a_0}$ – удвоенный боровский радиус.

После отделения угловых переменных и применения ПЛ к полученному дифференциальному уравнению для u_1, нетрудно найти лапласовский образ функции u_1:

$$\bar{u}_1(p) = \frac{2m}{(p-\beta)^\ell p^{\ell+2}} \int_\beta^p ds\,(s-\beta)^{\ell-1} s^{\ell+1} \int_0^\infty dt\, e^{-st} f(t)\, t^{\ell+2}. \tag{5}$$

Следовательно, используя таблицы ПЛ [4], для оригинала u_1 имеем:

$$u_1(r) = 2m e^{\beta r} \int_0^\infty dt\, f(t) \sum_{k=0}^{k=\ell-1} \frac{C_{\ell-1}^k (-\beta)^{\ell-1-k}}{t^k} \left\{ \sum_{s=0}^{s=k} C_k^s \times \right.$$
$$\times \sum_{m=0}^{m=\ell-s-1} C_{\ell-s-1}^m \frac{r^{\ell-s-m-1}}{(\ell-s-1)!} \frac{(-1)^m \gamma(k+m+\ell+2, \beta r_<)}{\beta^{s+m+\ell+2}} -$$
$$\left. - \frac{\gamma(k+\ell+2, \beta t)}{(\ell-1)!(\ell+1)!} \sum_{m=0}^{m=\ell-1} C_{\ell-1}^m \frac{r^{\ell-1-m} (-1)^m \gamma(m+\ell+2, \beta r)}{\beta^{m+\ell+2}} \right\} \tag{6}$$

где $\gamma(\alpha, x)$ – неполная гамма-функция, $\theta(x)$ – ступенчатая функция, $r_>$ ($r_<$) – большее (меньшее) из r и t, $C_k^m = \frac{k!}{m!(k-m)!}$.

Если рассмотреть случай поверхностного распределения ММЯ, когда $f(t)$ задается формулой

$$f(t) = \begin{cases} t^\ell / R_0^{2\ell+1}, & t \le R_0 \\ 1/t^{\ell+1}, & t > R_0 \end{cases} \tag{7}$$

то, после подстановки (7) в (6) и интегрирования, находим:

$$u_1(r) = 2m\sum_{k=0}^{l-1} C_{l-1}^{k} e^{\beta r}(-\beta)^{l-k-1}\Big\{\sum_{s=0}^{s=k} C_k^s \sum_{m=0}^{m=l-s-1} C_{l-s-1}^{m} \times$$

$$\times \frac{r^{l-s-m-1}(-1)^m}{(l-s-1)!\,\beta^{s+m+l+2}}\cdot\Big[\frac{r_<^{l-k+1}\gamma(k+m+l+2,\beta r_<)}{(l-k+1)R_0^{2l+1}} -$$

$$- \frac{\gamma(2l+m+3,\beta r_<)}{(l-k+1)\beta^{l-k+1}R_0^{2l+1}} + \theta(r-R_0)\frac{\beta^{l+k}}{l+k}\left[\gamma(m+2,\beta r)-\gamma(m+2,\beta R_0)\right] + \qquad (8)$$

$$+ \frac{\gamma(k+l+m+2,\beta r_<)}{(l+k)R_0^{l+k}} + \theta(R_0-r)\frac{\gamma(k+l+m+2,\beta r)\left[R_0^{l-k+1}-r^{l-k+1}\right]}{(l-k+1)R_0^{2l+1}}\Big] -$$

$$- \sum_{m=0}^{m=l-1} C_{l-1}^{m}\frac{r^{l-1-m}(-1)^m\gamma(l+m+2,\beta r)}{(l-1)!(l+1)!\,\beta^{l+m+2}}\Big[\frac{\beta^{l+k}\Gamma(2,\beta R_0)}{l+k} +$$

$$+ \frac{(\beta R_0)^{l-k+1}\gamma(l+k+2,\beta R_0)-\gamma(2l+3,\beta R_0)}{(l-k+1)\beta^{l-k+1}R_0^{2l+1}} + \frac{\gamma(k+l+2,\beta R_0)}{R_0^{l+k}(l+k)}\Big]\Big\}.$$

С другой стороны, применение редуцированной кулоновской функции Грина [5] подсказывает более компактную форму записи для u_1 (ср. с (6)):

$$u_1(r) = \frac{2m(-1)^{l-1}}{\beta^{2l+1}(l-1)!(l+1)!}\int_0^\infty dt\,\frac{f(t)}{t^{l-1}}\Big[V_1(\beta r)V_2(\beta t)\theta(r-t) - \qquad (9)$$

$$- V_1(\beta r)V_1(\beta t)e^{-\beta t} + V_1(\beta t)V_2(\beta r)\theta(t-r)e^{\beta(r-t)}\Big],$$

где $$V_1(x) = \sum_{k=0}^{k=l-1} C_{l-1}^{k}(-x)^{l-1-k}(l+k+1)!\sum_{s=0}^{s=l+k+1}\frac{x^s}{s!},$$

$$V_2(x) = \sum_{k=0}^{k=l-1} C_{l-1}^{k}(-x)^{l-1-k}(l+k+1)!$$

Таким образом, для искомой поправки к энергии от ММЯ во втором порядке ТВ с учетом (6,9) получим:

$$E_2^r = \frac{\alpha^2 Q_\ell^2 (-1)^{\ell-1} \beta^{2-2\ell}}{4(\ell+1)!(\ell-1)!} \Big[2 \int_0^\infty dr \frac{f(r)}{r^{\ell-1}} \int_0^\infty dt \frac{f(t)}{t^{\ell-1}} \times$$

$$\times V_1(\beta r) V_2(\beta t) e^{-\beta r} \theta(r-t) - \Big| \int_0^\infty dr \frac{f(r) e^{-\beta r}}{r^{\ell-1}} V_1(\beta r) \Big|^2 \Big]. \qquad (\text{I0})$$

В частном случае $n = 1$, $\ell = 2$ формулы (9,I0) совпадают с результатами работы [6]. Ограничиваясь низшим порядком по α из формулы (I0), будем иметь следующее выражение для E_2^r через интегралы от плотности распределения ММЯ:

$$E_2^r = \frac{\alpha^2 \beta^3 (2\ell+1)}{2} \int_0 d^3\vec{x} \rho(\vec{x}) Y_{\ell 0}(\vec{n}_x) \int_0 d^3\vec{y} \rho(\vec{y}) Y_{\ell 0}(\vec{n}_y) \times$$

$$\times \left[\frac{\theta(y-x) x^{\ell+4} y^{\ell-1}}{(2\ell+3)(2\ell+5)} + \frac{\theta(y-x) x^{\ell} y^{3-\ell}}{(2\ell-1)(2\ell-3)} - \frac{2\theta(x-y) x^{1-\ell} y^{\ell+2}}{(2\ell-1)(2\ell+3)} \right]. \qquad (\text{II})$$

С помощью вышеприведенных формул (I0,II) можно исследовать роль различных видов деформации ядра на сверхтонкую структуру основного состояния атомов и мезоатомов. Так, например, отметим, что для поверхностного распределения ММЯ численная оценка отношения $E_2^r(\ell=4)/E_2^r(\ell=2) \approx 6\%$ для мюонных атомов. Здесь $E_2^r(\ell=4)$ и $E_2^r(\ell=2)$ – соответственно поправки от гексадекапольного и квадрупольного моментов ядра.

ЛИТЕРАТУРА

1. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. –М.: Физматгиз, 1963.
2. Маханек А.Г., Корольков В.С. Аналитические методы в квантово-механической теории возмущений.–Минск : Наука и техника, 1982.
3. Ким,Е. Мезонные атомы и ядерная структура.– М.: Атомиздат, 1975.
4. Бейтмен Г., Эрдейи А. Таблицы интегральных преобразований. Т.I. – М.: Наука, 1969.
5. Шерстюк А.И. Приведенная кулоновская функция Грина радиального уравнения Шредингера. – Оптика и спектроскопия, 1971, Т. 30, вып. 2, с. 356.
6. Трофименко Е.Е. Квадрупольный момент ядра и сверхтонкая структура основного состояния легкого водородоподобного атома. – –Оптика и спектроскопия, 1986, Т. 60, вып. 3, с. 456.