Доклады Академии Наук СССР
1953. Том XCI, № 1

ФИЗИКА

Д. Д. ИВАНЕНКО и Н. Н. КОЛЕСНИКОВ

ОБЪЕМНЫЙ ЭФФЕКТ В ИЗОТОПИЧЕСКОМ СДВИГЕ В ВОДОРОДЕ И ДЕЙТЕРИИ

(Представлено академиком А. А. Лебедевым 6 V 1953)

Как известно, радиоспектроскопические изменения позволили обнаружить сдвиг термов $2S_{1/2}-2P_{1/2}$ в водороде и дейтерии, который в основном объясняется как различными вакуумными электромагнитными эффектами, так и учетом обычного эффекта содвижения ([1]). Однако необходимо учесть поправки, возникающие вследствие неэлектромагнитных сил (к ним относится, прежде всего, известный в теории изотопического смещения учет объема ядер), которые, очевидно, нельзя рассматривать как точечные ([2]). Необходимость подсчета подобных поправок диктуется также тем, что изотопическое смещение в H и D не совсем точно согласуется с экспериментальными данными, причем расхождение достигает порядка 1 Мгц.

Сдвиг электронного терма за счет объемного эффекта, который возникает вследствие отклонения электрического поля вблизи ядер от кулоновского, может быть подсчитан по формуле:

$$\Delta E=\int_0^\infty (\Phi_1^2+\Phi_2^2)\left(V+\frac{e^2}{r}\right)dr, \tag{1}$$

где Φ_1 и Φ_2 — радиальные дираковские функции электрона; V — потенциал электрического поля, создаваемый ядром. Для нахождения V можно использовать нерелятивистские волновые функции протона в дейтероне, которые определяются как решение соответствующего уравнения Шредингера. Если рассматривать 1 S-состояние и не учитывать примеси D-состояния, то уравнение приводится к виду:

$$\frac{d^2U_p}{dr^2}-\frac{M}{h^2}(W+\mathscr{E})\,U_p=0, \tag{2}$$

где $\mathscr{E}$ — энергия связи дейтерона; M — приведенная масса; W — потенциальная энергия. Поскольку применение более точного, юкавского закона мало изменяет результат, можно принять потенциал взаимодействия нуклеонов в виде $W=-W_0$ при $r<r_0$ и нуль при $r>r_0$. Тогда, используя известные решения ([3]), определяем потенциал, создаваемый протоном, волновая функция которого определяется согласно ([3]):

$$V(r)=\int_0^\infty \frac{U_p^2(r')\,e^2dv'}{r'^2\,|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\,. \tag{3}$$

Вычисляя интеграл в предыдущем выражении, получаем:

$$-V(r)=\begin{cases}2\pi e^2D_0^2\left\{1-\dfrac{\sin 2\beta_0 r}{2\beta_0 r}+\ln\dfrac{r_0}{r}+\operatorname{Ci}(2\beta_0 r)-\right.\\ \qquad\left.-\operatorname{Ci}(2\beta_0 r_0)-2\sin^2\beta_0 r_0 e^{2\beta r_0}\operatorname{Ei}(-2\beta r_0)\right\}, & r<r_0;\\ 2\pi e^2D_0^2\dfrac{r_0}{r}\left\{1-\dfrac{\sin 2\beta_0 r_0}{2\beta_0 r_0}+\dfrac{\sin^2\beta_0 r_0}{\beta_0 r_0}\left(1-e^{-2\beta(r-r_0)}\right)-\right.\\ \qquad\left.-\dfrac{2r\sin^2\beta r_0}{r_0}e^{2\beta r_0}\operatorname{Ei}(-2\beta r)\right\}, & r>r_0;\end{cases}\tag{4}$$

$$\beta=\frac{2\sqrt{M\mathcal{E}}}{\hbar},\quad D_0=\sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}\left(\beta r_0+\sin^2\beta_0 r_0-\frac{\beta}{2\beta_0}\sin 2\beta_0 r_0\right)^{-1/2},$$

$$\beta_0=\frac{2\sqrt{M(W_0-\mathcal{E})}}{\hbar}.$$

Подставляя (4) в (1), а также используя значения Φ_1 и Φ_2, находим

$$\Delta E=-\frac{\beta e^2 r_0}{6a_0^3}\left(\beta r_0+\sin^2\beta_0 r_0-\frac{\beta}{2\beta_0}\sin 2\beta_0 r_0\right)^{-1}\left\{\frac{1}{6}+4\sin^2\beta_0 r_0 e^{2\beta r_0}\operatorname{Ei}(-2\beta r_0)-\right.$$
$$\left.-\frac{\sin 2\beta_0 r_0}{4\beta_0 r_0}\left(1-\frac{1}{2\beta_0^2 r_0^2}\right)-\frac{\cos 2\beta_0 r_0}{4\beta_0^2 r_0^2}+\frac{\sin^2\beta_0 r_0}{\beta r_0}\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{\beta r_0}-\frac{1}{2\beta^2 r_0^2}+\frac{3}{4\beta_0 r_0}+\frac{3}{8\beta\beta_0 r_0^2}\right)\right\},\tag{5}$$

где a_0 — боровский радиус, $\alpha=e^2/\hbar e$.

Считая $r_0=1{,}71\cdot10^{-13}$ см; $\mathcal{E}=2{,}2$ Мэв; $W_0=35$ Мэв, получим:

$$\Delta E=-0{,}775\ \text{Мгц}.\tag{6}$$

Однако в предыдущем подсчете не были учтены искажения волновой функции вследствие размазанности протона в дейтероне. Последнее обстоятельство учитывается методом уточненных функций, согласно которому ищутся решения уравнения Дирака для внутренней области (где потенциал может иметь любой вид) и для внешней области, где справедлив чисто кулоновский закон [4]. Так как отклонения (5) от кулоновского закона ничтожно малы при больших r благодаря экспоненциальному спаданию дополнительных членов, то, беря радиус сшивания, например, $R_0=5r_0>2/\beta$, можно с большой точностью считать потенциал при $r>R_0$ кулоновским. Ошибка, возникающая при этом, составляет лишь $-0{,}001$ Мгц, т. е. очень мала.

Для нахождения решения уравнения Дирака в области $r<R_0$ целесообразно заменить $V(r)$ аппроксимирующим полиномом, в котором достаточно ограничиться 5 членами:

$$a_0+a_1\frac{r}{r_0}+a_2\left(\frac{r}{r_0}\right)^2+a_3\left(\frac{r}{r_0}\right)^3+a_4\left(\frac{r}{r_0}\right)^4,\tag{7}$$

проходящим через точки: $V(0)$; $V(1{,}5r_0)$; $V(3r_0)$; $V(4r_0)$; $V(5r_0)=e^2/5r_0$. Как показывают подсчеты, это хорошо аппроксимирует (5) в области $0<r<R_0$. Кроме того, для улучшения аппроксимации производилось добавочное уточнение с помощью обычного метода по формуле (1). Решение соответствующих радиальных уравнений Дирака для внутренней области, которое ищется в виде разложения в ряд по степеням r/r_0, имеет вид:

$$\Phi_{1i}=-\alpha a\left\{\frac{1}{3}\left(a_0-\frac{h_0}{\alpha}\right)+\frac{a_1}{4}\left(\frac{r}{r_0}\right)^2+\frac{a_2}{5}\left(\frac{r}{r_0}\right)^3+\frac{a_3}{6}\left(\frac{r}{r_0}\right)^4+\frac{a_4}{7}\left(\frac{r}{r_0}\right)^5+O(\alpha^2)\right\},$$
$$\Phi_{2i}=a\{1-O(\alpha^2)\},\tag{8}$$

где $h_0=(E_0-E)r_0/\hbar c$.

Решение для внешней области $r>R_0$ удобно выразить через функции Уиттекера W, которые имеют смысл как для целых, так и для нецелых главных квантовых чисел n [5]:

$$\left.\begin{cases}\Phi_{1e} \\ \Phi_{2e}\sqrt{\dfrac{E_0+E}{E_0-E}}\end{cases}\right\} = C\,\frac{\Gamma(-n'-2\gamma)}{\Gamma(-2\gamma)}\{-n'(n'+2\gamma)\,W_{n'+\gamma-1/2,\,\gamma}(x) \pm$$
$$\pm (N-\varkappa)\,W_{n'+\gamma+1/2,\,\gamma}(x)\}; \tag{9}$$

где $n' = n - |\varkappa|$; $\gamma = \sqrt{\varkappa^2 - \alpha^2 Z^2}$; $N = \sqrt{n^2 - 2n'(|\varkappa| - \sqrt{\varkappa^2 - \alpha^2 Z^2})}$; Z — заряд ядра; C — нормировочная константа. Легко видеть, что при целых $n' = n$, (9) переходит в обычное решение с соответствующей константой C_0. Сшивая решения (8) и (9), получаем:

$$\Delta n = n' - n'_0 \approx 2\alpha^2 Z n_0^2\,\frac{R_0^2}{\lambda_0^2}\left(1 - \frac{2}{\alpha}\,\frac{\Phi_{1i}(R_0)}{\Phi_{2i}(R_0)}\right), \quad \lambda_0 = \frac{\hbar}{mc}. \tag{10}$$

Подсчет сдвига терма при тех же значениях параметров, что и раньше, дает $\Delta n = 0{,}038\alpha^2 n_0^2 (R_0/\lambda_0)^2$,

$$\Delta E = \left|\frac{\partial (E_0 - E)}{\partial n}\right|_{n_0} \Delta n = -\frac{\alpha^2 Z^2}{8\pi\lambda_0}\,\frac{\Delta n}{n_0^3} = -0{,}00151\,\frac{\alpha^4}{n_0\lambda_0}\left(\frac{R_0}{\lambda_0}\right)^2 \text{см}^{-1}. \tag{11}$$

Подсчет по формуле (11) при учете поправок для $2S$-уровня дает:

$$\Delta E_D = -0{,}78 \text{ Мгц}. \tag{12}$$

(6) и (12) почти точно совпадают, причем значение ΔE согласно (12) больше лишь на 0,2%, что говорит о дополнительном эффекте искажения волновых функций. Однако в то время как для объемного эффекта метод уточненных функций дает лишь малую поправку, порядка 0,01 Мгц, влияние искажения электронных волновых функций на вакуумный эффект будет достигать уже порядка нескольких десятых мегагерца, что существенно для сравнения с экспериментом. В связи с этим становится важным определение нормировочной константы C в (9).

Обозначая $\Phi_{1e} = C_1\varphi_{1e}$; $\Phi_{2e} = C_0\varphi_{2e}$; $\Phi_1^0 = C_0\varphi_1^0$; $\Phi_2^0 = C_0\varphi_2^0$ и учитывая, что $\Delta n = n' - n'_0$ мало, а функция Уиттекера является непрерывной функцией n', и что $C' = C_0 + \Delta C$, находим в первом приближении:

$$\frac{\Delta C}{C_0} = \frac{C_0^2}{2}\int_0^{R_0} (\varphi_1^{0\,2} + \varphi_2^{0\,2} - \varphi_{1i}^2 - \varphi_{2i}^2)\,dr - C_0^2\,\Delta n\left|\frac{\partial}{\partial n'}\int_{R_0}^{\infty} (\varphi_1^0\varphi_{1e} + \varphi_2^0\varphi_{2e})\,dr\right|_{n=n_0}, \tag{13}$$

где φ_1^0 и φ_2^0 — соответствующие решения при целочисленных $n' = n'_0$, а C_0 — соответствующая нормировочная константа.

Вычисление первого интеграла в (13) не представляет большого труда. При вычислении второго интеграла удобно использовать представление функций Уиттекера в виде контурных интегралов:

$$W_{n'+\gamma-1/2,\,\gamma}(x) = -\frac{1}{2\pi i}\,\Gamma(n')\,e^{-x/2}x^{n'+\gamma-1/2}\int_{C'} (-t)^{-n'}\left(1+\frac{t}{x}\right)^{n'+2\gamma-1} e^{-t}\,dt,$$

$$W_{n'+\gamma+1/2,\,\gamma}(x) = -\frac{1}{2\pi i}\,\Gamma(n'+1)\,e^{-x/2}x^{n'+\gamma+1/2}\int_{C'} (-t)^{-n'-1}\left(1+\frac{t}{x}\right)^{n'+2\gamma} e^{-t}\,dt, \tag{14}$$

где $x = Zr/Na_0$, причем контур интегрирования C' выходит из $+\infty$, обходит $t = 0$ против часовой стрелки и возвращается опять в $+\infty$.

Далее (14) и (9) подставлялись в (13) и проводилось интегрирование сначала по r, а затем по t, причем в φ_1^0, являющейся комбинацией конфлюентных гипергеометрических функций, последние представлялись в виде обрывающихся рядов, которые затем интегрировались почленно (аналогично и φ_2^0). При вычислении оказалось, что при дифференцировании наибольший вклад дает член $\partial\Gamma(-n'-2\gamma)/\partial n'$, который при $n'=n_0'$ с большой степенью точности равен

$$\left|\partial\Gamma(-n'-2\gamma)/\partial n'\right|_{n'=n_0'} = 1/\alpha^2 Z^2.$$

В результате вычисления находим

$$\frac{\Delta C}{C_0} \approx \frac{C_0^2\,\Delta n\, 4 n_0^2 n_0'^2\,\Gamma(n_0')}{\alpha^4 Z^4} \times$$

$$\times \sum_p \sum_q \frac{\Gamma(n_0'+2)\,\Gamma(n_0'+2-q+p)\,\Gamma(p-n_0'+1)\,\Gamma(2\gamma+1)}{\Gamma(n_0'-q)\,\Gamma(q+1)\,\Gamma(n_0'+1-q)\,\Gamma(1-n_0')\,\Gamma(2\gamma+1+p)\,\Gamma(p)} \times$$

$$\times \left\{-1 + \frac{(N_0-\varkappa)(n_0'-p)}{n_0'} - \frac{(N_0-\varkappa)}{(n_0'+2\gamma)}\,\frac{(n_0+2)(n_0'+2-q+p)}{(n_0'-q)(n_0'+1-q)} + \right.$$

$$\left. + \frac{(N_0-\varkappa)^2}{(n_0'+2\gamma)}\,\frac{(n_0'+2)}{(n_0'-p)}\,\frac{(n_0'+2-q+p)}{(n_0'-q)(n_0'+1-q)}\right\}. \tag{15}$$

В частности, для $2S$-уровня водорода

$$\frac{\Delta C}{C_0} = -\frac{2}{\alpha^2}\Delta n, \tag{15a}$$

поэтому $\Psi^2(r) \approx \Psi_0^2(r)\left(1-\frac{4}{\alpha^2}\Delta n\right)$. Подставляя значение Δn, находим: $\Psi^2(0) \approx \Psi_0^2(0)\ (1-0{,}297\cdot 10^{-3})$. Следовательно, вакуумный сдвиг, формула для которого содержит $\Psi^2(0)$, уменьшается на 0,19 Мгц (аналогичным образом изменится величина сверхтонкого расщепления).

Для сравнения с экспериментальным сдвигом H — D следует учесть еще объемный эффект для H, возникающий за счет виртуальной диссоциации протона. Для оценки этого сравнительно небольшого эффекта заметим, что энергию взаимодействия p — e можно представить уменьшенной на величину $\tau\frac{e^2}{r}e^{-2k_0 r}$ (см. ([7])). Вычисление по формуле (1) тогда дает: $\Delta E_{\mathrm{H}} = -\frac{\tau\alpha}{16\pi k_0^2 a_0^3}$ см$^{-1}$, т. е. 0,11 Мгц. Учет сил взаимодействия электрон — нейтрон и электрон — протон в дейтероне дает поправку + 0,04 Мгц. Таким образом, полный объемный изотопический сдвиг H — D (включая объемно-вакуумный эффект) составит 0,44 Мгц.

Отметим, что объемный эффект подсчитывался нами при частном предположении, что потенциал ядерного взаимодействия имеет характер прямоугольной ямы. Увеличение величины r_0 или учет более пологого спадания краев ямы улучшает согласие с экспериментом. В итоге, учтя еще примеси D состояния, можно достичь практически полного согласия с экспериментом. Однако, ввиду недостаточной надежности ряда параметров, наша задача заключалась не столько в получении количественных данных на базе анализа взаимодействия нуклеонов, сколько в доказательстве возможности подсчета изотопического смещения наиболее последовательным образом без привлечения специальных гипотез.

Московский государственный
университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило
17 IV 1953

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] W. Lamb, R. Retherford, Phys. Rev., **86**, 1014 (1952); J. Schwinger, ibid., **86**, 288 (1952). [2] А. Соколов, Д. Иваненко, Квантовая теория поля, М.—Л., 1952. [3] А. Ахиезер, И. Померанчук, Некоторые вопросы теории ядра, М. — Л., 1950. [4] Д. Иваненко, А. Цандер, ЖЭТФ, **18**, 434 (1948). [5] Е. Уиттекер, Г. Ватсон, Курс современного анализа, **2**, 1934. [6] E. Broch, Arch. Math. Natur., **48**, 1 (1945). [7] Д. Иваненко, В. Родичев, ДАН, **70**, 801 (1950).