



**ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ**

4-2006-9

На правах рукописи  
УДК 530.145 + 539.184

**КОРОБОВ**  
Владимир Иванович

**ВАРИАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ  
В КВАНТОВОЙ ЗАДАЧЕ ТРЕХ ТЕЛ  
И ПРЕЦИЗИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ**

Специальность: 01.04.02 — теоретическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Дубна 2006

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики имени Н.Н. Боголюбова Объединенного института ядерных исследований.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук  
профессор

И.Л. Бейгман

доктор физико-математических наук  
профессор

В.Г. Пальчиков

доктор физико-математических наук  
профессор

Р.Н. Фаустов

Ведущая организация:

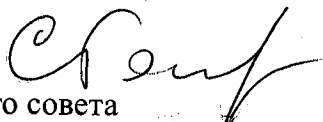
Российский научный центр  
"Курчатовский институт", Москва

Защита диссертации состоится на заседании специализированного совета Д 720.001.01 в Лаборатории теоретической физики имени Н.Н. Боголюбова Объединенного института ядерных исследований, « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2006 г. по адресу г. Дубна, Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного института ядерных исследований.

Автореферат разослан « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2006 г.

Ученый секретарь диссертационного совета  
доктор физико-математических наук



С.В. Голоскоков

## Общая характеристика работы

**Актуальность проблемы.** Квантовая задача трех тел с кулоновским взаимодействием является одной из наиболее известных неинтегрируемых задач квантовой механики. Вместе с тем задача на связанные состояния для системы трех частиц допускает "сколь угодно" точные численные решения на современных компьютерах. К примеру, нерелятивистская энергия основного состояния гелия с ядром бесконечной массы известна в настоящее время с точностью до 35 значащих цифр.

Вместе с тем имеется широкий класс физических задач, которые имеют практический интерес. Классическим примером субатомной физики является мюонный катализ и физика экзотических мюонных атомов и молекул. Одной из ключевых задач мюонного катализа является прецизионное исследование слабосвязанных состояний мюонных молекулярных ионов  $dd\mu_{11}$  и  $dt\mu_{11}$ . Энергии этих слабосвязанных состояний определяют скорости резонансного образования мюонных молекул, через которые в конечном итоге выражаются ключевые параметры полного цикла мюонного катализа<sup>1</sup>.

Другим примером из физики экзотических атомов и молекул является атом антипротонного гелия  $\text{He}^+\bar{p}$ . Антипротон замещает один из электронов атома гелия и при определенных условиях формирует метастабильные состояния со временем жизни в несколько микросекунд! Кроме того, что это рекордное время жизни для античастицы, находящейся в обычной (реальной) среде. Это также астрономическое время по меркам обычной атомной физики, где время жизни  $2P$  состояния атома водорода имеет порядок одной наносекунды.

Атом антипротонного гелия представляет нетривиальный пример квантовой системы, у которой состояния дискретного спектра являются короткоживущими, тогда как в непрерывном спектре существует остров метастабильных состояний. Эти состояния по своим свойствам практически ничем не отличаются от состояний дискретного спектра в обычном атоме (или молекуле). Они допускают прецизионную спектроскопию энергий переходов и тонкой сверхтонкой структуры уровней, что позволяет получить ценную информацию о физических свойствах антипротона.

В настоящий момент в ЦЕРНе проводятся эксперименты по исследованию атомов антипротонного гелия на установке AD (эксперимент ASACUSA). Результаты недавних прецизионных измерений энергий переходов показывают, что они уже чувствительны к погрешности отношения масс протона к электрону. По всей видимости дальнейший анализ позволит впервые определить массу античастицы, антипротона (по отношению к массе электрона) с точностью лучшей, чем это известно для реальной частицы, протона.

Большое значение трехчастичные системы с кулоновским взаимодействием

---

<sup>1</sup>Л.И. Пономарев, Contemporary Physics 31, 219 (1991)

ем имеют для метрологии. Так, в рекомендуемых CODATA-98 значениях физических констант, для магнитного момента ядра атома гелия-3 дается значение "экранированного" магнитного момента. Иначе говоря это значение было получено в экспериментах с атомом и включает в себя также поправки на связанное состояние атома. Прецизионные измерения тонкого расщепления в  $2^3P$  состоянии атома гелия-4 вместе с точными теоретическими расчетами могут быть использованы для определения значения константы тонкой структуры,  $\alpha$ . В настоящий момент результаты различных экспериментов, использующие такие эффекты как квантовый эффект Холла или эффект Джозевсона, находятся в противоречии с наиболее точным экспериментом, основанном на измерении  $g$ -фактора электрона. И имеются основания полагать, что измерения тонкой структурой атома гелия помогут объяснить и, может быть, устранить эти противоречия.

**Основной целью** данной диссертации является разработка универсального метода для решения квантовой задачи трех тел с кулоновским взаимодействием. Это включает в себя как проблему вычисления нерелятивистских уровней энергии, так и развитие методов расчета релятивистских и радиационных поправок в системе трех частиц. Известно, что квантовая электродинамика связанных состояний хорошо разработана для системы двух частиц<sup>2</sup>. Более того, существование аналитического решения значительно облегчает решение проблемы сокращения расходимостей, возникающих в высших порядках. Однако большинство известных подходов, таких как уравнение Бете-Салпитера или эффективное уравнение Дирака, плохо распространяются на системы с большим числом частиц. В диссертации рассматривается подход, основанный на эффективной теории поля, нерелятивистской квантовой электродинамике, который, как нам представляется, наиболее естественным образом позволяет обобщить теорию на три и более частицы.

**Научная новизна и практическая значимость результатов.** Все представленные на защиту результаты являются оригинальными разработками автора диссертации.

Всего десять лет назад вычисление ведущих радиационных поправок для основного состояния атома гелия было основным источником неопределенности в теоретических расчетах. Предлагаемая процедура вычисления логарифма Бете, составляющего основную вычислительную трудность при определении ведущих радиационных поправок, позволила определить значение этой величины для различных физических систем нескольких частиц, как атомов так и молекул, с точностью порядка 6-8 знаков. Данная точность достаточна для того чтобы иметь предсказания интервалов энергий с относительной точностью порядка  $10^{-10} - 10^{-12}$ .

---

<sup>2</sup>M.I. Eides, H. Grotch, and V.A. Shelyuto, Physics Reports 342, 63 (2001).

Идеи метода и практическая процедура вычисления логарифма Бете с минимальными изменениями были применены другими авторами для вычислений в многоэлектронных атомах лития и бериллия.

Результаты теоретических расчетов использовались в экспериментах по мюонному катализу в ЛЯП, PSI (Швейцария), в экспериментах по прецизионной спектроскопии атомов антипротонного гелия ASACUSA (ЦЕРН).

Практическая значимость результатов подтверждается высоким индексом цитируемости (около 660, по информации сайта [www.scientific.ru](http://www.scientific.ru)).

### На защиту выдвигаются следующие результаты:

1. Предложен универсальный вариационный метод, основанный на "экспоненциальном" вариационном разложении. Показано, что этот метод дает наилучшие значения нерелятивистских уровней энергии для всех практически интересных физических систем. Единственным исключением является основное состояние атома гелия, для которого был предложен специальный метод, учитывающий логарифмическую особенность в точке тройного соударения, и включающий в разложение аналитически сложные пробные функции. "Экспоненциальное" разложение позволяет получить для основного состояния атома гелия 26 значащих цифр, что более чем достаточно для прецизионной спектроскопии этого атома.
2. Разработана теория возмущения для изолированных резонансов, который позволяет распространить методы вычисления релятивистских и радиационных поправок для связанных состояний на квазистационарные состояния.
3. Созданы методы расчета ведущей радиационной поправки порядка  $m\alpha^5$  для произвольной системы трех частиц конечной массы. Эффективность и высокая точность предлагаемой схемы вычислений продемонстрирована на примерах атома гелия и молекулярных ионов изотопов водорода. Разработаны методы вычисления релятивистских и радиационных поправок в порядке  $m\alpha^6$  для систем трех частиц с одним и двумя электронами.
4. Получена энергия ионизации основного состояния атома гелия с учетом всех поправок порядков  $\alpha^4$ ,  $\alpha^3 m_e/m_\alpha$  и  $\alpha^5 \ln^2 \alpha$  по отношению к нерелятивистской энергии.
5. На основе развитых методов проведено всестороннее исследование экзотических атомов антипротонного гелия. Вычислены с высокой точностью  $\sim 10^{-10} - 10^{-15}$  атомных единиц нерелятивистские уровни энергии метастабильных состояний атома антипротонного гелия. Определены скорости Оже распада для метастабильных состояний. Вычислены

теоретические значения тонкого и сверхтонкого расщепления уровней. Вычислены интервалы энергий переходов с погрешностью, которая позволяет определить значение массы антипротона с точностью превосходящей погрешность в значении массы протона, как она определяется в "CODATA'02 recommended values".

**Апробация диссертации.** Результаты диссертации докладывались и обсуждались на семинарах в Лаборатории теоретической физики имени Н.Н. Боголюбова и Лаборатории ядерных проблем Объединенного института ядерных исследований, в РИЦ "Курчатовский институт", в международных центрах КЕК (Япония) и ЦЕРН (Швейцария), а также в университетах Флориды (г.Гейнсвилл, США), Гренобля (Франция), Дюссельдорфа (Германия), Токио и Фукуока (Япония), Гарвард (США).

Результаты были представлены на международных конференциях, в том числе как приглашенные доклады на ITAMP'96 в Гарварде, Кембридж, США; LEAP'96, Динкельсбюль, Германия, LEAP'03, Иокोगама, Япония; Asia Pacific Few-Body (APFB'99), Токио, Япония; Hydrogen-II: Precise Spectroscopy of Atomic Systems (PSAS'2000), Кастильоне делла Пескайя, Италия; Европейская Few-Body (EFBP'00), Евора, Португалия;  $\mu$ CF and Exotic Atoms, 1998, Аскона, Швейцария, и  $\mu$ CF, 2001, Шимода, Япония.

**Публикации.** По материалам исследований, представленных в диссертации, опубликовано 25 работ в ведущих физических журналах.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Она содержит 43 таблицы и 24 рисунка. Объем работы составляет 145 страниц и включает библиографический список литературы из 186 наименований.

## Содержание диссертации

**В первой главе** излагаются основы вариационного метода применительно к решению уравнения Шредингера на связанные состояния. Дается анализ выбора различных форм базисных функций разложения вариационного решения и стратегии построения базисных последовательностей, обеспечивающих эффективную скорость сходимости. Формулируется метод *экспоненциального разложения с многослойным выбором нелинейных вариационных параметров* или просто "экспоненциальное" разложение, которое в дальнейшем используется для решения поставленных в диссертации задач.

В § 1.1 формулируется вариационный принцип для связанных состояний. Приводится теорема Рисса-Фишера (принцип минимакса) и ее применимость

для задач нерелятивистской квантовой механики<sup>3</sup>.

Анализ вариационных функций для основного состояния атома гелия приводится в § 1.2. Показывается как учет основных особенностей решения приводит к ускорению сходимости метода.

Учет состояний с ненулевым угловым моментом дается в § 1.3. Здесь также описываются молекулярное разложение и разложение по гауссовым функциям ("гауссианам").

В § 1.4 даются основные формулы определяющие "экспоненциальное" разложение.

Волновая функция состояния с полным угловым моментом  $L$  и полной пространственной четности  $\pi$  разлагается в ряд

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \sum_{l_1+l_2=\mathcal{L}} \mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) G_{l_1 l_2}^{L\pi}(r_1, r_2, r_{12}), \\ G_{l_1 l_2}^{L\pi}(r_1, r_2, r_{12}) &= \sum_n C_n e^{-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma_n r_{12}}, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\mathcal{L} = L$ , или  $L + 1$ , в зависимости от пространственной четности состояния  $\pi$ , а параметры в экспоненте генерируются псевдослучайным образом.

$$\begin{aligned} \alpha_n &= \left[ \left[ \frac{1}{2}n(n+1)\sqrt{p_\alpha} \right] (A_2 - A_1) + A_1 \right], \\ \beta_n &= \left[ \left[ \frac{1}{2}n(n+1)\sqrt{p_\beta} \right] (B_2 - B_1) + B_1 \right], \\ \gamma_n &= \left[ \left[ \frac{1}{2}n(n+1)\sqrt{p_\gamma} \right] (C_2 - C_1) + C_1 \right]. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $[x]$  обозначает дробную часть  $x$ , а  $p_\alpha$ ,  $p_\beta$  и  $p_\gamma$  – некоторые простые числа. Преимущество этих простых генераторов псевдослучайных чисел состоит в воспроизводимости результатов вариационных вычислений.

К недостаткам метода следует отнести медленную сходимость для систем с двумя тяжелыми частицами. Рецепт, позволяющим избавиться от этого недостатка, является использование комплексных экспонент и переход к базису:

$$\begin{aligned} \Psi(r_1, r_2, r_{12}) &= \sum_{n=1}^N \left\{ C_n \operatorname{Re}[\exp(-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma_n r_{12})] \right. \\ &\quad \left. + D_n \operatorname{Im}[\exp(-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma_n r_{12})] \right\}. \end{aligned} \quad (3)$$

Замедление сходимости наблюдается при больших  $N$  при вычислении основного состояния атома гелия, а также в молекулярных расчетах, особенно для состояний с большим вибрационным квантовым числом. Последнее объясняется тем, что частота осцилляций (волновое число) зависит от  $R$  – расстояния между ядрами в системе и его изменение обусловлено спаданием потенциала эффективного взаимодействия между тяжелыми частицами. В то

<sup>3</sup>Т. Kato, Trans. Amer. Math. Soc. 70, 195 (1951); 212 (1951).

система		$E$
$\text{He}(1^1S)$	ЭР	-2.9037243770341195983111594(4)
	Дрейк, Кассар и Нистор (2002)	-2.903724377034119598311(1)
$e^-e^-e^+$	ЭР	-0.2620050702329801077(3)
	Фролов (1999)	-0.262005070232976
$\text{He}(2^3P)$	ЭР	-2.13316419077928310(2)
	Ян, Дрейк (1992)	-2.13316419077927(1)
$^4\text{He}^+\bar{p}(L=35, v=0)$	ЭР	-2.98402095449725(1)
	Кйно (1998)	-2.98402094
$\text{H}_2^+(L=0, v=0)$	ЭР	-0.597139063123405076(2)
	Мосс (1999)	-0.5971390631234
$\text{H}_2^+(L=0, v=19)$	ЭР	-0.499731230655812(2)
	Мосс (1992)	-0.49973123063

Таблица 1: Примеры расчетов трехчастичных систем. ( $L$  – полный орбитальный момент,  $v$  – вибрационное квантовое число)

же время, оптимизируя вариационный интервал для нелинейного параметра, который определяет волновое число решения в наиболее существенной для энергии области, мы получаем неэффективное приближение в других областях по  $R$ . Чтобы исправить создавшееся положение необходимо строить *многослойное* вариационное разложение, состоящее из нескольких независимых наборов базисных функций, оптимальные вариационные нелинейные параметры для которых ищутся независимым образом. Таким образом каждый "слой", набор базисных функций, определяет оптимальное приближение в определенной области координат системы. Подобная стратегия приводит к тому, что экспоненциальное разложение становится высокоэффективным и универсальным методом решения для связанных состояний в квантовой задаче трех тел с кулоновским взаимодействием. Возможности этого метода были продемонстрированы в [6] и [7] и иллюстрируются численными расчетами, приводимыми в таблице 1.

Чтобы решить проблему численной неустойчивости расчетов при больших значениях  $N$  автором были разработаны модули программ четверной, шестерной и восьмерной точности (соответственно, 32, 48 и 64 десятичных цифр) для фортрана-90. Важной особенностью нового стандарта фортрана является возможность использовать модули расширенной точности без существенного изменения исходных программ.

**Глава 2** посвящена изложению метода комплексного вращения координат



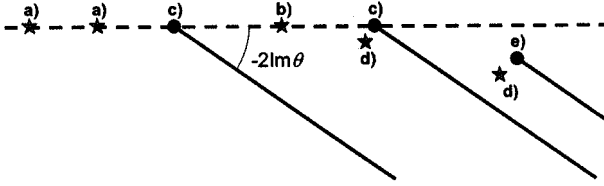


Рис. 1: Спектр  $H(\theta)$ ; a) — связанные состояния

нат, как метода для исследования резонансов. Здесь же формулируется теория возмущений для изолированных резонансов и приводится пример ее применения для вычисления релятивистских поправок к скорости распада резонансного состояния. В последнем параграфе этой главы рассматривается одна из сложнейших с вычислительной точки зрения задач, определение квадрата амплитуды волновой функции в точке парного соударения двух ядер. На примере резонанса Фешбаха в молекулярном ионе  ${}^3\text{He}d\mu$  демонстрируются вычислительные возможности метода "экспоненциального" вариационного разложения.

В §2.1 даются математические основы метода комплексного вращения для исследования резонансов. В частности приводится теорема Балслева и Комба<sup>4</sup>, которая утверждает, что оператор Шредингера,  $H = T + \sum V_{ij}$ , для системы нескольких частиц с дилатационно аналитическими парными потенциалами,  $V_{ij}(\theta)$ , сам является дилатационно аналитичным и допускает продолжение в комплексную область по параметру дилатации  $\theta$ , при этом спектр  $H(\theta)$  преобразуется, как показано на рисунке 1, и положение комплексных полюсов (резонансов) не зависит от изменения параметра  $\theta = \theta_r + i\theta_i$ .

В §2.2 формулируется метод комплексного вращения координат, в котором все координаты динамической системы преобразуются в комплексной плоскости:  $r_{ij} \rightarrow r_{ij}e^{i\varphi}$ , где  $\varphi$  — параметр комплексного вращения. При этом гамильтониан системы с кулоновским взаимодействием изменяется особенно просто,

$$H_\varphi = T e^{-2i\varphi} + V e^{-i\varphi}. \quad (4)$$

$T$  и  $V$  — операторы кинетической и кулоновской потенциальной энергии, соответственно. Собственная функция уравнения,  $(H_\varphi - E)\Psi_\varphi = 0$ , является квадратично интегрируемой и соответствующее комплексное собственное значение,  $E = E_r - i\Gamma/2$ , определяет энергию  $E_r$  и ширину  $\Gamma$  резонанса.

<sup>4</sup>E. Balslev and J.M. Combes, Commun. Math. Phys. **22**, 280 (1971).

	Re	Im
$E_{NR}$	-2.847324042(3)	$3.714(3) \cdot 10^{-6}$
$\mathbf{p}_e^4$	48.7142(4)	0.0089(4)
$\delta(\mathbf{r}_{He})$	1.60580(1)	0.00029(1)
$\delta(\mathbf{r}_{\bar{p}})$	0.05392	0.000015
$E_{rel}$	-2.847384174(5)	$3.702(5) \cdot 10^{-6}$

Таблица 2: Средние значения операторов,  $\mathbf{p}^4$  и  $\delta(\mathbf{r})$ ; релятивистские поправки к энергии и Оже ширине состояния (38, 33) атома  ${}^4\text{He}^+\bar{p}$ .

Далее для построения теории возмущения для квазистационарных состояний формулируется теорема доказанная Саймоном<sup>5</sup>:

**Теорема.** Пусть  $H$  — гамильтониан системы частиц с кулоновским взаимодействием, и  $W(\theta)$  — дилатационно аналитическое возмущение. Пусть  $E_0$  — изолированное простое комплексное собственное значение оператора  $H(\theta)$ . Тогда для малых значений параметра  $\beta$  существует в точности одно собственное значение оператора  $H(\theta) + \beta W(\theta)$  в окрестности  $E_0$  и функция

$$E(\beta) = E_0 + a_1\beta + a_2\beta^2 + \dots \quad (5)$$

является аналитической в окрестности  $\beta = 0$ . В частности,

$$a_1 = E'(0) = \langle \Psi_\theta^* | W(\theta) | \Psi_\theta \rangle / \langle \Psi_\theta^*, \Psi_\theta \rangle \quad (6)$$

Использование этой теоремы иллюстрируется примером для состояния  $(n, l) = (38, 33)$  атома антипротонного гелия  ${}^4\text{He}^+\bar{p}$ . Релятивистские поправки на связанный электрон в ведущем порядке описываются гамильтонианом Брейта-Паули:

$$E_{rc} = \alpha^2 \left\langle -\frac{\mathbf{p}_e^4}{8m_e^3} + \frac{4\pi}{8m_e^2} [Z_{\text{He}}\delta(\mathbf{r}_{\text{He}}) + Z_{\bar{p}}\delta(\mathbf{r}_{\bar{p}})] \right\rangle.$$

Оба оператора входящие в это выражение дилатационно аналитичны,

$$\delta_\varphi(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})e^{-3i\varphi}, \quad \mathbf{p}_\varphi^4 = \mathbf{p}^4e^{-4i\varphi}.$$

В Таблице 2 приведены результаты расчетов. Полученные средние значения дают поправки к комплексному собственному значению, что изменяет не только энергию состояния, но и время жизни, позволяя получить физическую скорость кулоновского распада данной системы.

<sup>5</sup>V. Simon, Ann. Math. **97**, 247 (1973).

В § 2.3 демонстрируются возможности "экспоненциального" разложения на примере решения одной очень сложной с точки зрения вариационных методов вычислительной задачи: определение среднего от оператора  $\delta^3(\mathbf{R})$  в точке соударения двух ядер в молекулярной системе. В качестве иллюстрации был выбран резонанс в системе  ${}^3\text{He}^{++}d\mu(L=0)$ . Для достижения необходимой точности использовался базис  $N=2900$  функций, вычисления проводились в арифметике шестерной точности (48 значащих цифр), окончательное значение  $F^2(0)$  есть комплексная величина,

$$F^2(0) = [-0.292(2) - i0.679(2)] \times 10^{-12} \text{ м.а.е.},$$

откуда имеем:  $|F(0)|^2 = 0.739(2) \cdot 10^{-12}$  м.а.е. Это хорошо согласуется с предыдущим расчетом, выполненным комбинированным методом с использованием адиабатического многоканального подхода для вычисления решения в области малых  $R$ .

**Глава 3.** В третьей главе рассматривается эффективная теория поля, "*нерелятивистская квантовая электродинамика*", и методы построения на основе данной теории эффективного гамильтониана поправок высших порядков в разложении по константе связи кулоновского взаимодействия,  $\alpha$ , для системы нескольких частиц. В конце главы излагаются два эффективных метода вычисления логарифма Бете для системы трех частиц, основанных на "экспоненциальном" разложении волновых функций промежуточных состояний. Средняя энергия возбуждения или логарифм Бете является наиболее сложной с вычислительной точки зрения величиной в ведущих поправках для энергии связанного состояния.

В § 3.1 эффективная теория поля "*нерелятивистская квантовая электродинамика*" (NRQED) формулируется в том виде как она была предложена Кажуеллом и Лепажем<sup>6</sup>. Решение строится в два этапа. Сначала определяется эффективный лагранжиан NRQED с константами связи (которых необходимо больше чем в КЭД) различных локальных взаимодействий нерелятивистской теории. Эти константы получаются из сравнения амплитуд рассеяния КЭД и NRQED так, чтобы предсказания теорий совпадали до определенного порядка по параметру  $\alpha$ . Следующим шагом является вычисление характеристик связанных состояний на основе построенного эффективного лагранжиана, который уже включает только взаимодействия для нерелятивистских значений момента импульса. На этом этапе все "новые" локальные взаимодействия включаются в рассмотрение последовательным использованием теории возмущений Релея–Шредингера.

Лагранжиан NRQED строится из нерелятивистских полей  $\psi$  для частиц входящих в систему: скалярных для скалярных частиц, спиноров Паули для частиц со спином  $1/2$  и т.д. Фотон с необходимостью является релятивист-

<sup>6</sup>W.E. Caswell and G.P. Lepage, Phys. Lett. B **167**, 437 (1986).

ским и определяется таким же образом, как и в КЭД.

$$\begin{aligned}
 L_{\text{eff}} = & -\frac{1}{2}(E^2 - B^2) + \psi_e^* \left( i\partial_t - e\varphi + \frac{\mathbf{D}^2}{2m} + \frac{\mathbf{D}^4}{8m^3} + \dots \right) \psi_e \\
 & + \psi_e^* \left( c_F \frac{e}{2m} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B} + c_D \frac{e}{8m^2} \mathbf{D} \mathbf{E} + c_S \frac{ie}{8m^2} \mathbf{D} \cdot \mathbf{E} \times \boldsymbol{\sigma} \right) \psi_e \\
 & + \text{higher order terms} + \text{muon, proton, etc.} \\
 & - \frac{d_1}{m_e m_\mu} (\psi_e^* \boldsymbol{\sigma} \psi_e) (\psi_\mu^* \boldsymbol{\sigma} \psi_\mu) + \frac{d_2}{m_e m_\mu} (\psi_e^* \psi_e) (\psi_\mu^* \psi_\mu) + \dots
 \end{aligned} \tag{7}$$

Здесь  $\mathbf{D} = \nabla + ie\mathbf{A}$ .

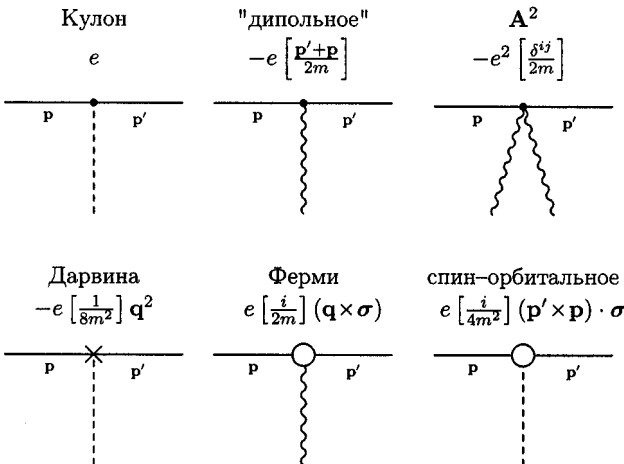
Основные требования:

- константы связи определяются из сравнения предсказаний КЭД и NRQED для нерелятивистской  $S$ -матрицы до заданного порядка по  $(v/c)$ ;
- калибровочная инвариантность, эрмитовость, локальность, симметрии обращения времени и сохранения четности.

Вклады из КЭД, которые определяются релятивистскими энергиями в петлях, входят в NRQED в форме различных локальных взаимодействий.

Требования калибровочной инвариантности и приближенная релятивистская инвариантность позволяют строить теорию возмущения от нерелятивистского уравнения Шредингера для произвольного числа частиц. Скорость распространения взаимодействия определяется скоростью поперечных фотонов или скоростью света.

Примеры основных взаимодействий иллюстрируются диаграммами Фейнмана для NRQED.



§ 3.2 демонстрирует, как из вершинных функций основных взаимодействий и пропагаторов (функций Грина) фотонов получается гамильтониан Брейта-Паули. В импульсном представлении это сводится к простому перемножению соответствующих функций, как и должно быть в древесном приближении. Далее показывается, как в случае сложных частиц (протон) со спином 1/2 модифицируются коэффициенты вершинных функций основных взаимодействий.

В § 3.3 рассматривается проблема вычисления собственной энергии электрона во внешнем поле. В § 3.4 выводятся эффективные операторы взаимодействия порядка  $m\alpha^5$ . Показано как в общем случае системы нескольких частиц вклады порядка  $m\alpha^5$  и  $m(m/M)\alpha^5$  сводятся к вычислению логарифма Бете:

$$\ln \frac{K_0}{R_\infty} = \frac{\sum_n |\langle 0|\mathbf{J}|n\rangle|^2 (E_n - E_0) \ln\{|E_n - E_0|/R_\infty\}}{\sum_n |\langle 0|\mathbf{J}|n\rangle|^2 (E_n - E_0)}, \quad (8)$$

где  $\mathbf{J}$  — оператор электромагнитного тока в атоме,  $\mathbf{J} = \sum_i z_i \mathbf{v}_i$ , и оператора,

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

введенного Араки и Сачером<sup>7</sup>

В последнем параграфе этой главы (§ 3.5) рассматривается два метода вычисления логарифма Бете, основанные на "экспоненциальном" разложении.

Отправной точкой для первого из них является прямая формула интегрирования по импульсам поперечных фотонов

$$\Delta E_{LS} = \frac{2}{3\pi} \frac{\alpha^3}{m^2} \int_0^K dk \sum_n \frac{\langle 0|\mathbf{J}|n\rangle (E_0 - E_n) \langle n|\mathbf{J}|0\rangle}{k(E_0 - E_n - k)}. \quad (9)$$

Введем две функции, которые входят как подинтегральные выражения в (9)

$$\begin{aligned} \tilde{J}(k) &= -\langle \psi_0 | \mathbf{J}(E_0 - H_0 - k)^{-1} \mathbf{J} | \psi_0 \rangle, \\ \tilde{w}(k) &= \langle \psi_0 | [H_0, \mathbf{J}](E_0 - H_0 - k)^{-1} [H_0, \mathbf{J}] | \psi_0 \rangle. \end{aligned}$$

Эти функции связаны соотношением:

$$\tilde{J}(k) = -\frac{1}{k} \langle \mathbf{J}^2 \rangle + \left[ \frac{2\pi}{k^2} \sum_{b>a} Z_a Z_b \left( \frac{Z_a}{M_a} - \frac{Z_b}{M_b} \right)^2 \langle \delta(\mathbf{r}_{ab}) \rangle \right] - \frac{1}{k^2} \tilde{w}(k). \quad (10)$$

<sup>7</sup>Н. Araki, Prog. Theor. Phys. 17, 619 (1957); J. Sucher, Phys.Rev. 109, 1010 (1958).

Для вычисления  $\tilde{J}(k)$  решается уравнение  $(E_0 - H - k)\psi_1 = \mathbf{J}\psi_0$ , а для  $\tilde{w}(k)$  используется соотношение (10) и асимптотическое разложение

$$\tilde{w}(k) \sim \frac{4\pi}{k} \sum_{i>j} Z_i^2 Z_j^2 \left( \frac{Z_i}{m_i} - \frac{Z_j}{m_j} \right)^2 [(2k)^{1/2} + Z_i Z_j \ln k] \langle \delta(\mathbf{r}_{ij}) \rangle + \frac{1}{k} \sum_{m=0}^{\infty} C_m k^{-m/2}.$$

В последней формуле коэффициенты  $C_m$  фитируются из данных для  $\tilde{w}(k)$ , полученных прямым вычислением.

Второй подход следует работе Голдмана и Дрейка, с той лишь разницей, что в расчетах используется экспоненциальное вариационное разложение. В этом методе используется прямая диагонализация оператора Гамильтона

$$\begin{aligned} \beta(n, L) &= \frac{\mathcal{N}}{\mathcal{D}} = \frac{\langle \mathbf{J}(H - E_0) \ln((H - E_0)/R_\infty) \mathbf{J} \rangle}{\langle [\mathbf{J}, [H, \mathbf{J}]]/2 \rangle} \\ &= \sum_n \frac{\mathbf{A}_{0n}(E_n - E_0)^{-1} \ln(|E_n - E_0|/R_\infty) \mathbf{A}_{n0}}{\mathbf{A}_{0n}(E_n - E_0)^{-1} \mathbf{A}_{n0}}, \end{aligned} \quad (11)$$

где  $\mathbf{A} = i[H, \mathbf{J}]$  — дипольный матричный элемент в "accélération" gauge. При этом для обеспечения высокой сходимости используются экспоненциально растущие экспоненты в базисных функциях разложения. Результаты счета для основного состояния гелия представлены в таблице 3. Здесь же дается ретроспектива предыдущих вычислений этой величины от первой работы Кабира, Салпитера.

P.K. Kabir, E.E. Salpeter (1953)	4.39(20)
C. Schwartz, (1961)	4.370(4)
S.P. Goldman, G.W.F. Drake (1983)	4.364
J. Baker <i>et al.</i> , (1993)	4.37012
A.K. Bhatia, R.J. Drachman, (1998)	4.367
V.I. Korobov, S.V. Korobov (1998)	4.370 158(2)
J. Baker <i>et al.</i> , (1998)	4.370 159(2)
G.W.F. Drake, S.P. Goldman, (1999)	4.370 160 218(3)
экспоненциальный расчет (интегральная форма)	4.370 160 21(2)
экспоненциальный расчет (прямая диагонализация)	4.370 160 2220(1)

Таблица 3: Вычисления логарифма Бете для основного состояния атома гелия.

Из таблицы хорошо видно, что основной прорыв в решении этой задачи произошел в 1998 году. Следует отметить, что метод Голдмана–Дрейка, эффективный в вычислениях для двухэлектронных атомов, дает значительно

менее точные результаты, чем подход основанный на интегральной форме, в случае молекулярных систем. Более того "интегральный" подход легко распространяется на системы с большим числом частиц и уже использовался для вычислений логарифма Бете основных состояний атомов лития и бериллия.

**Глава 4** посвящена приложению методов, изложенных в предыдущих главах. Здесь описываются: расчет энергии ионизации основного состояния атома гелия с учетом поправок до  $Ryd \cdot \alpha^4$  включительно; релятивистские поправки к дипольной поляризуемости основного состояния молекулярного иона водорода  $H_2^+$ ; вычисление логарифма Бете для ротационно-вибрационных состояний молекулярных ионов  $H_2^+$  и  $HD^+$  и другие физические задачи.

В § 4.1 вычисляется ионизационный потенциал основного состояния гелия с учетом всех релятивистских и радиационных поправок порядков  $Ryd \cdot \alpha^2$ ,  $Ryd \cdot \alpha^3$ ,  $Ryd \cdot \alpha^4$  и  $Ryd \cdot \alpha^5 \ln^2 \alpha$ . Расчет полного вклада всех поправок в порядке  $Ryd \cdot \alpha^4$  для синглетных состояний (четное состояние двух электронов) произведен впервые. Сложность этих вычислений состоит в том, что часть операторов определяющих вклад в порядке  $Ryd \cdot \alpha^4$  расходится. Отсутствие аналитического решения делает задачу сокращения расходящихся существенно более сложной, чем в случае системы двух частиц, однако все возникающие расходящиеся могут быть выделены и сокращены на уровне операторов эффективного гамильтониана без обращения к явному виду волновой функции. Результаты вычисления приведены в таблице 4.

	$\delta\nu_{th}(1^1S), \text{МГц}$
нерелятивистское приближение	5 945 262 288.62(4)
$\alpha^2$	-16 800.338(4)
$\alpha^3$	-40 483.996(50)
$\alpha^4$	-834.9(2)
$\alpha^5 \ln^2 \alpha$ (и выше)	84 (42)
конечные размеры ядра	-29.55(4)
итого	5 945 204 223 (42)

Таблица 4: Вклады различных порядков в полный ионизационный потенциал основного состояния атома гелия. Погрешность, приведенная в нерелятивистском значении, связана с погрешностью на массу ядра.

Сравнение полученного результата со значениями последних экспериментов

$$\nu_{\text{exp}}^{1S-2P}(1^1S) = 5\,945\,204\,238(45) \text{ МГц}, \quad (12)$$

и

$$\nu_{\text{exp}}^{1S-2S}(1^1S) = 5\,945\,204\,356\,(48) \text{ МГц}, \quad (13)$$

извлеченных из измерений  $1^1S-2^1P$  (8) и  $1^1S-2^1S$  (9) интервалов, соответственно, показывают что теоретическое значение более согласуется с (12) и лежит в пределах  $2\sigma$  от (13).

В § 4.3 вычисляются значения логарифма Бете для молекулярных ионов  $\text{H}_2^+$  и  $\text{HD}^+$ . Полный спин-независимый вклад порядка  $\alpha^3$  и  $\alpha^3(m/M)$  (ведущая радиационная поправка) в случае одноэлектронной молекулы может быть выражен:

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

где  $\beta(L, v)$  — логарифм Бете. До сих пор ни одного *ab initio* вычисления логарифма Бете не было выполнено для случая положительных молекулярных ионов изотопов водорода. "Средняя энергия возбуждения" электрона была впервые вычислена<sup>10</sup> в приближении двух неподвижных центров для различных длин связи в диапазоне до  $6a_0$ . В диссертации получены значения  $\beta(L, v)$  для ротационно-вибрационных состояний с  $L = 0 \div 4$  и  $v = 0 \div 4$  с учетом эффектов отдачи (конечной массы ядер). Относительная вычислительная погрешность составила порядка  $10^{-6}$ , этого достаточно, чтобы обеспечить точность для интервалов энергий вибрационных переходов на уровне  $10^{-11} - 10^{-12}$  в предположении, что все необходимые поправки высших порядков будут включены в расчет.

**В последней главе** представлены результаты исследований по прецизионной спектроскопии метастабильных состояний атомов антипротонного гелия, полученные автором. Сначала формулируется подход, основанный на формализме Фешбаха, строятся проекционные операторы на подпространство закрытых каналов. Предложенный подход позволяет применять вариационные методы для вычисления уровней энергий состояний. Использование формализма Фешбаха дало возможность увеличить точность расчетов сразу на много порядков и однозначно подтвердить гипотезу Кондо о природе метастабильности в антипротонном гелии. Далее в главе рассматриваются

<sup>8</sup>K.S.E. Eikema, W. Ubachs, W. Vassen, and W. Hogervorst, Phys. Rev. A **55**, 1866 (1997).

<sup>9</sup>S.D. Bergeson, A. Balakrishnan, K.G.H. Baldwin, T.B. Lucatorto, J.P. Marangos, T.J. McIlrath, T.R. O'Brian, S.L. Rolston, C.J. Sansonetti, J. Wen, N. Westbrook, C.H. Cheng, and E.E. Eyler, Phys. Rev. Lett. **80**, 3475 (1998).

<sup>10</sup>R. Bukowski, B. Jeziorski, R. Moszyński, and W. Kołos, Int. J. Quantum Chem. **42**, 287 (1992).



методы определения скоростей Оже распада, эта характеристика важна для определения острова стабильности состояний  $\text{He}^+\bar{p}$ , находящихся в непрерывном спектре атома. Использование метода комплексного вращения координат и вычисление релятивистских и радиационных поправок позволяет довести теоретические расчеты энергий переходов до уровня порядка  $10^{-9}$  относительной точности, что делает их чувствительными к погрешностям в отношениях масс частиц протона (антипротона) к электрону. В последнем параграфе описываются расчеты тонкого и сверхтонкого расщепления уровней состояний атома антипротонного гелия-4.

**В Заключение** сформулированы основные результаты, полученные в диссертации.

## Основные результаты диссертации опубликованы в работах

- [1] С.И. Виноцкий, В.И. Коробов, И.В. Пузынин. Вариационное вычисление уровней энергии  $\mu$ -мезомолекул изотопов водорода. *ЖЭТФ* **91**, 705 (1986).
- [2] С.И. Виноцкий, В.И. Коробов, И.В. Пузынин. Вариационный расчет характеристик слабосвязанных вращательно-колебательных состояний мезомолекул  $dd\mu$  и  $dt\mu$ . *Краткие сообщения ОИЯИ*, № 19-86, Дубна, 1986.
- [3] С.И. Виноцкий, В.И. Коробов, И.В. Пузынин. Уточнение уровней энергии слабосвязанных вращательно-колебательных состояний мезомолекул  $dd\mu$  и  $dt\mu$ . *Краткие сообщения ОИЯИ*, № 23-87, Дубна, 1987.
- [4] В.И. Коробов. Регуляризация экстремальных собственных значений для симметричной обобщенной задачи. *ЖВМиМФ*, **28**, 1443 (1988).
- [5] В.И. Коробов. Анализ уравнения Шредингера в представлении симметрии Брейта-Хиллерааса. *Ядерная физика* **50**, 1595 (1989).
- [6] V.I. Korobov, Coulomb three-body bound state problem: Variational calculations of nonrelativistic energies, *Phys. Rev. A*, **61** 064503 (2000).
- [7] V. Korobov, Nonrelativistic ionization energy for the helium ground state. *Phys. Rev. A* **66**, 024501 (2002).
- [8] V.I. Korobov and S.V. Korobov, The Bethe logarithm for the  $1^1S$  and  $2^1S$  states of helium, *Phys. Rev A* **59** (1999) 3394-3396.

- [9] V. Korobov, The Bethe logarithm for the helium atom. *Phys. Rev. A* **69**, 054501 (2004).
- [10] V. Korobov, The Bethe logarithm for the hydrogen molecular ion  $\text{HD}^+$ , *Phys. Rev. A* **70**, 012505 (2004).
- [11] S. Schiller and V. Korobov, Tests of time-independence of the electron and nuclear masses with ultracold molecules, *Phys. Rev. A* **71**, 032505 (2005).
- [12] V. Korobov and A. Yelkhovsky, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 193003 (2001).
- [13] Д.Д. Бакалов, В.И. Коробов, Релятивистские поправки к уровням энергии слабосвязанных состояний мезомолекул  $dd\mu$  и  $dt\mu$ , *Краткие сообщения ОИЯИ*, №35-89, Дубна, 1987.
- [14] D. Bakalov and V.I. Korobov, Muonic Molecules: Beyond the Coulomb Model, *Hyperfine Interactions* **138**, 265 (2001).
- [15] V.I. Korobov, Dynamic polarizability properties of the weakly bound  $dd\mu$  and  $dt\mu$  molecular ions, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **37**, 2331 (2004).
- [16] D. Bakalov, K. Bakalova, V.I. Korobov, H.J. Monkhorst and I. Shimamura. Quadrupole splitting of the weakly bound systems  $[(dt\mu)_{11}dee]$  and  $[(dd\mu)_{11}dee]$ . *Phys. Rev. A*, **57** (1998) 3370-3375.
- [17] V.I. Korobov. High Accuracy Calculation of Metastable States of Antiprotonic Helium Atoms. *Hyperfine Interactions* **101/102** (1996) 479-485.
- [18] V.I. Korobov. Variational Calculation of Energy Levels in  $\bar{p}\text{He}^+$  Molecular Systems. *Phys. Rev. A*, **54** (1996) 1749-1752.
- [19] V.I. Korobov and D.D. Bakalov. Energies and relativistic corrections for the metastable states of antiprotonic helium atoms. *Phys. Rev. Lett.*, **79** (1997) 3379.
- [20] V.I. Korobov, D. Bakalov and H.J. Monkhorst, Variational expansion for the antiprotonic helium atoms, *Phys. Rev A* **59**, R919 (1999).
- [21] V.I. Korobov and I. Shimamura. Auger transition rates for metastable states of antiprotonic helium  $\text{He}^+\bar{p}$ . *Phys. Rev. A*, **56**, 4587 (1997).
- [22] V. Korobov, Metastable states in the antiprotonic helium atom decaying via Auger transitions. *Phys. Rev. A* **67**, 062501 (2003).
- [23] D.D. Bakalov and V.I. Korobov. The hyperfine structure of antiprotonic helium energy levels. *Phys. Rev. A*, **57** (1998) 1662-1667.

- [24] V.I. Korobov and D. Bakalov, Fine and hyperfine structure of the  $(37, 35)$  state of the  ${}^4\text{He}^+\bar{p}$  atom, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **34**, L519-L523 (2001).
- [25] V.I. Korobov, Regular and singular integrals for relativistic and QED matrix elements of the Coulomb three-body problem, for an exponential basis set, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **35**, 1959 (2002).

Получено 27 января 2006 г.

Отпечатано методом прямого репродуцирования  
с оригинала, предоставленного автором.

Подписано в печать 30.01.2006.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 1,06. Уч.-изд. л. 1,30. Тираж 100 экз. Заказ № 55201.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований  
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: [publish@pds.jinr.ru](mailto:publish@pds.jinr.ru)

[www.jinr.ru/publish/](http://www.jinr.ru/publish/)