Low Temperature Physics/Физика низких температур, 2016, т. 42, № 9, с. 936–942

Влияние структуры ядра на электронный спектр атома гелия

Т.Н. Анцыгина, К.А. Чишко

Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Науки, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: chishko@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 4 февраля 2016 г., после переработки 9 марта 2016 г., опубликована онлайн 25 июля 2016 г.

Методом точной диагонализации рассчитаны поправки к основному состоянию атома ^{4}He, связанные с конечным размером и конечной массой его ядра, которое в рамках оболочечной модели интерпретируется как связанное состояние двух дейтронов. Известный из эксперимента квадрупольный момент дейтрона ($Q_0 = 2{,}74\cdot10^{-27}$ см^2) дает возможность оценить размер отдельного дейтрона, а с ним и размер ядра ^{4}He (диаметр ядра $d \sim 1{,}5\cdot10^{-13}$ см). В результате ядро ^{4}He оказывается составленным из четырех нуклонов в основном состоянии $(1s)^4$ на сферически симметричной оболочке диаметром d, по которой равномерно распределен полный заряд ядра, равный $+2e$. Такое распределение, в свою очередь, может быть интерпретировано как основное состояние жесткого ротатора, на концах которого закреплены заряды величиной $+e$. В такой модели ядро представляет собой заряженную сферическую оболочку радиуса $d/2$, внутри которой потенциал остается постоянным и конечным, равным $4e/d$, а за пределами — убывает по обычному кулоновскому закону $2e/r$. Наличие такой «сердцевины» означает поправку к стандартному кулоновскому потенциалу при $r < d/2$, которая понижает энергию основного состояния атома ^{4}He на малую величину ε_1, но не приводит к возникновению каких-либо новых низкоэнергетических уровней. Эта величина, в свою очередь, оказывается сравнимой с поправкой к основному состоянию ^{4}He из-за конечной массы ядра.

Методом точної діагоналізації розраховано поправки до основного стану атома ^{4}He, які зумовлені скінченним розміром та скінченною масою його ядра, що у межах оболонкової моделі інтерпретується як зв'язаний стан двох дейтронів. Відомий з експерименту квадрупольний момент дейтрону ($Q_0 = 2{,}74\cdot10^{-27}$ см^2) робить можливим оцінити розмір окремого дейтрону, та з ним і розмір ядра ^{4}He (діаметр ядра $d \sim 1{,}5\cdot10^{-13}$ см). В результаті ядро ^{4}He виявляється складеним з чотирьох нуклонів в основному стані $(1s)$ ^{4}He на сферично симетричній оболонці діаметром d, по якій рівномірно розподілений повний заряд ядра, що дорівнює $+2e$. Такий розподіл, у свою чергу, може бути інтерпретований як основний стан жорсткого ротатора, на кінцях якого закріплені заряди величиною $+e$. У такій моделі ядро є зарядженою сферичною оболонкою радіуса $d/2$, всередині якої потенціал залишається постійним і скінченним та дорівнює $4e/d$, а за межами оболонки спадає за звичайним кулонівським законом $2e/r$. Наявність такого «осередку» означає поправку до стандартного кулонівського потенціалу при $r < d/2$, що знижує енергію основного стану атома ^{4}He на малу величину ε_1, але не призводить до виникнення будь-яких нових низькоенергетичних рівнів. Ця ж величина, у свою чергу, виявляється порівняною з поправкою до основного стану атома ^{4}He, що виникає через скінченну масу ядра.

PACS: *31.15.ac* Высокоточные расчеты для нескольких электронов (или нескольких) атомных систем.

Ключевые слова: атом ^{4}He, поправки к спектру ^{4}He.

1. Введение

Радиочастотный отклик сверхтекучего гелия в СВЧ диапазоне [1–8] является предметом активных дискуссий на протяжении последних десяти лет. Эффект резонансного поглощения СВЧ накачки в сверхтекучем потоке в общих чертах соответствует картине возбуждения некоего низколежащего внутриатомного уровня (с энергией порядка 8 К над основным состоянием). Этот уровень оказывается вырожденным, и вырождение снимается в постоянном внешнем электрическом поле, причем здесь наблюдается линейный эффект

Штарка [6–8]. Задача об атоме гелия во внешнем электрическом поле решена в [9] методом точной диагонализации. Развитая в [9] процедура позволила не только с высокой точностью получить известный из эксперимента спектр нижайших электронных состояний атома ^{4}He (без учета возможных релятивистских и нерелятивистских поправок), но и абсолютно точно воспроизвести систематику этих уровней как для пара-, так и для ортогелия. Здесь мы воспользуемся таким подходом для обсуждения возможности появления низкоэнергетических электронных возбуждений в атоме по причине возможной несферичности потенциала составляющих его частиц (ядра или электронов). Рассмотрение этой задачи представляется важным в плане объяснения экспериментально наблюдаемых явлений.

Для интерпретации СВЧ эффектов в гелии обычно привлекают соображения, которые в конечном счете сводятся к попытке постулировать наличие у атома гелия в основном состоянии (в котором, конечно, он должен находиться при низких температурах) некоего квадрупольного момента [10,11], т.е. предположить, что изолированный атом гелия в основном состоянии создает в окружающем пространстве дальнодействующее электрическое поле, потенциал которого на далеких расстояниях спадает степенным образом (обратно пропорционально кубу расстояния). Такой постулат представляется сомнительным, поскольку он ведет к дополнительной электростатической энергии основного состояния, происхождение котрой не может быть рационально обосновано (если поля ядра и электрона являются строго центросимметричными, потенциал атома за пределами электронной оболочки спадает экспоненциально, и квадрупольный момент свободного атома гелия в основном состоянии в отсутствие внешних полей в точности равен нулю [9]). Еще один подход к проблеме основан на идее, что электрон имеет некую внутреннюю структуру, при которой центр распределения заряда частицы не совпадает с ее центром инерции. В результате в поле точечного кулоновского ядра электрон движется как асимметрический волчок, который обладает одновременно неким дипольным моментом [12]. Таким образом, для интерпретации электродинамического отклика сверхтекучего гелия привлекается гипотеза о существовании дополнительных (помимо спина) внутренних степеней свободы электрона. Концепция внутренней структуры электрона остается в настоящее время чисто гипотетической, экспериментально какие-либо электрические моменты (дипольный, квадрупольный и т.д.) у электрона не обнаружены. Потому, обсуждая возможные эффекты от наличия нецентросимметричных взаимодействий в атоме, мы рассмотрим здесь более очевидную задачу о поправках к электронному спектру гелия, рассматривая ядро ^{4}He не как точечный заряд $Z = +2e$, а как комплекс из двух пространственно разнесенных зарядов $Z = +e$. Такой подход может быть обоснован в рамках оболочечной модели ядра [13,14].

2. Модель

Хорошо известно, что свойства легких ядер с нулевым магнитным моментом (и, в особенности, α-частиц как простейших представителей группы дважды магических ядер [13]) могут быть успешно интерпретированы в рамках оболочечной модели [13–15] (см. также [16], наряду с этим прекрасное изложение общефизической картины устройства легких ядер содержится в книге [17]). Согласно оболочечной модели движение нуклонов в ядре может быть описано двухкомпонентной волновой функцией, составленной как линейная комбинация прямых произведений координатных функций, задающих пространственное распределение вероятности для протона–нейтрона, на соответствующий двухкомпонентный вектор, определяющий зарядовое состояние нуклона [14]. Полный гамильтониан системы нуклонов включает оператор кулоновского взаимодействия протонов и оператор ядерного взаимодействия между нуклонами, отвечающий гипотезе зарядовой независимости ядерных сил [13,14,16]. При этом нуклонам приписываются определенные квантовые числа [15,18] точно так же, как это делается для случая электронов в атомах. В результате основное состояние ядра ^{4}He может быть представлено как система четырех нуклонов в 1*s*-состоянии, т.е. $(1s)^4$ [14]. В этом состоянии ядро $^4_2$He имеет нулевой спин и магнитный момент, а также большую энергию связи, –28,11 МэВ (–7,03 МэВ/нуклон). В рамках такой модели материя ядра будет локализована в некой области конечного размера, за пределами которой волновая функция экспоненциально убывает, и заряд ядра $Z = +2e$ следует считать распределенным сферически симметрично внутри этой области. Таким образом, оболочечная модель естественным образом включает в себя параметр размерности длины, который должен быть ассоциирован с размером ядра. Для радиуса ядра R_{nuc} в предположении о некоторых деталях распределения ядерной материи внутри сферы соответствующего размера принята полуэмпирическая оценка [17], $R_{\text{nuc}} \sim (1{,}2\text{–}1{,}5)\cdot 10^{-13}\ A^{-1/3}$ см (где A — число нуклонов в ядре). Конечная масса, размеры и форма ядра являются причиной нерелятивистских поправок к электронным спектрам атомов. Принято считать, что учет конечной массы ядра ($M_{\text{nuc}} = 7352 m_e$, m_e — масса электрона) сдвигает как целое электронный спектр гелия с ядром бесконечной масы, ε_∞, вниз по шкале энергий [13,19] на малую величину $-2m_e\varepsilon_\infty/M_{\text{nuc}} \sim 0.273\cdot 10^{-3}\varepsilon_\infty$ (как будет показано ниже в подразделе 3.2, соответствующее значение, рассчитанное методом точной диагонализации, оказывается на порядок меньше). Вклад этой поправки уменьшается с ростом массы ядра, поправки же, связанные с размером и формой ядра (так называемое изотопическое смещение [13,20]), напротив, оказываются более существенными для тяжелых элементов.

Тем не менее, несмотря на заведомую малость такого рода поправок, мы хотим оценить их величину для легкого ядра ^{4}He с тем, чтобы выяснить вопрос о возможности появления низкоэнергетических возбуждений в спектре атома гелия.

Другая причина, по которой одной из существенных характеристик ядра должна быть его форма (и, соответственно, размер), может быть заключена в следующем. Пара свободных протонов взаимодействует между собой посредством кулоновского отталкивания и не образует связанного состояния, так что атом ^{2}He в природе не наблюдается. Простейшей атомной системой из двух протонов без нейтронов является молекула H_2, где положительно заряженные протоны пространственно разнесены и разделены отрицательным зарядом валентных электронов. Свободный нейтрон имеет конечное время жизни и распадается на протон, электрон и антинейтрино. Связанное состояние двух нейтронов (бинейтрон) неустойчиво. Устойчивым связанным состоянием двух нуклонов (протон+нейтрон) является дейтрон ^{2}H с энергией связи –2,23 МэВ. Дейтрон имеет заряд $Z = +e$ и спин, равный единице. Наиболее интересным является наблюдаемый экспериментально квадрупольный момент дейтрона, равный $2{,}74\cdot10^{-27}$ см^2. Напомним, что в атомной физике, где заряды всех частиц кратны элементарному заряду e, квадрупольный момент определяется [14] как $Q_0 = Q/e$ (где Q есть истинный электрический квадрупольный момент системы зарядов [21]). Таким образом, Q_0 оказывается чисто геометрическим параметром, характеризующим несферичность пространственного распределения внутриядерного вещества или электронной плотности в атомных оболочках. Для оценок представим дейтрон как связанное состояние двух точечных нуклонов, помещенных в точках $x = \pm d/2$. Заряд протона e появляется в крайних точках интервала с вероятностью $1/2$, так что квадрупольный момент дейтрона равен $Q_0 = d^2/8$. Подставляя сюда численное значение квадрупольного момента, находим $d \sim 1{,}5\cdot10^{-13}$ см, что прекрасно согласуется с приведенной выше оценкой [17] для A = 2. Квадрупольный момент дейтрона можно также оценить, полагая, что заряд e равномерно распределен на интервале $|x| \le d/2$. В этом случае имеем $Q_0 = d^2/12$, а оценка для $a \sim 1{,}8\cdot10^{-13}$ см практически не отличается от приведенной выше.

В результате ядро $^4_2$He в основном состоянии может быть представлено как связанное состояние двух дейтронов (бозонов) с противоположными спинами. Чистый выход реакции $^2\mathrm{H}+^2\mathrm{H}\to^4\mathrm{He}+\gamma$ составляет 24 МэВ, так что основное состояние ядра $^4_2$He является рекордно устойчивым в ряду остальных легких ядер. Пространственная конфигурация такого состояния в рамках оболочечной модели может быть реализована в виде кольца радиуса порядка d, вдоль которого расположены четыре нуклона, два из которых являются протонами, а два остальных — нейтронами, причем протонные и нейтронные состояния должны чередоваться для того, чтобы вдоль кольца сохранялись устойчивые дейтронные связи, обеспечивающие стабильность ядра. Конфигурация будет стабильной только в том случае, если процесс перезарядки соседних пар нуклонов будет строго коррелированным, а это означает, что два «мгновенных» протона будут «бежать» по кольцу, оставаясь точно друг против друга на противоположных концах общего диаметра, что в точности соответствует ротатору с зарядами на концах. Само же кольцо (а следовательно, и ядро) можно рассматривать как симметрический волчок, причем вследствие деформации за счет кулоновского отталкивания диаметрально противоположных протонных зарядов, принадлежащих одной и той же оболочке, ядро должно иметь форму эллипсоида вращения. Представление о несферических ядрах было разработано О. Бором и Б. Моттельсоном [15,22,23]. Кроме того, в книге Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшица [13] (§119) специально подчеркнута аналогия между классификацией уровней несферического ядра и классификацией состояний двухатомной молекулы, составленной из одинаковых атомов. В результате кулоновское поле ядра $^4_2$He на расстояниях $r >> d$ можно рассматривать как поле квадруполя, составленного из двух протонов с координатами $\mathbf{R}_{1,2} = \pm\,\mathbf{d}/2)$. Степени свободы такого квадруполя совпадают со степенями свободы жесткого ротатора. Что же касается момента инерции такого ротатора, то этот вопрос может быть решен только на грубо качественном уровне. Для расчетов, проведенных ниже, мы принимаем этот момент инерции равным $I = M_p d^2/2$ (M_p — масса протона). Как будет видно из дальнейшего, это не повлияет существенно на основные выводы работы. Ротатор в основном состоянии (а именно в этом состоянии находится ядро в атоме гелия) формирует сферически симметричное распределение заряда в ядре диаметром d, и такой же результат получается для ядра $^4_2$He из четырех нуклонов в сферически симметричном состоянии $(1s)^4$.

3. Две поправки к электронному спектру

В этом разделе мы сначала рассчитаем поправку к электронному спектру гелия, происходящую от учета конечного размера ядра, а затем сравним ее с поправкой за счет конечной массы ядра.

3.1. Конечный размер ядра

Рассмотрим задачу о состояниях двухэлектронной оболочки атома гелия в поле электрического квадруполя, степени свободы которого задаются полярным и азимутальным углами Θ и Φ (центр квадруполя совпадает с началом координат). Электроны оболочки находятся в точках с координатами r_a и r_b. В единицах Хартри гамильтониан такой задачи имеет вид

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_a - \frac{1}{2}\Delta_b + \frac{1}{|r_a - r_b|} +$$

$$+ H^{(\text{nucl})}(\Theta,\Phi) + H^{(\text{int})}(\Theta,\Phi,r_a,r_b). \qquad (1)$$

Здесь $H^{(\text{nucl})}(\Theta,\Phi)$ — гамильтониан ротатора [16],

$$H^{(\text{nucl})}(\Theta,\Phi) = \frac{L^2}{2I} =$$

$$= -B\left[\frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial}{\partial\Theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\Theta}\frac{\partial^2}{\partial\Phi^2}\right], \qquad (2)$$

где $B = 1/2I$ — вращательная постоянная,

$$H^{(\text{int})}(\Theta,\Phi,\mathbf{r}_a,\mathbf{r}_b) = -\sum_{s=a,b}\left(|\mathbf{r}_s - \frac{\mathbf{d}}{2}|^{-1} + |\mathbf{r}_s + \frac{\mathbf{d}}{2}|^{-1}\right) =$$

$$= -4\pi\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1+(-1)^l}{2l+1}\sum_{s=a,b}\Gamma_l\left(r_s,\frac{d}{2}\right)\sum_{m=-l}^{l}Y^*_{lm}(\Theta,\Phi)Y_{lm}(\vartheta_s,\varphi_s), \qquad (3)$$

причем

$$\Gamma_l\left(r,\frac{d}{2}\right) = \begin{cases} \frac{1}{r}\left(\frac{d}{2r}\right)^l & \text{if} \quad r > \frac{d}{2} \\ \frac{2}{d}\left(\frac{2r}{d}\right)^l & \text{if} \quad r < \frac{d}{2} \end{cases}. \qquad (4)$$

При $\mathbf{d} = 0$ выражение (1) переходит в гамильтониан для двух электронов, движущихся в центральном поле с зарядом $\mathcal{Z} = +2$ (бесспиновый атом гелия [9]).

Как и в изученном ранее в [9] случае атома гелия с центросимметричным ядром, квантово-механическая задача (1) может быть решена методом точной диагонализации, однако использованный в указанной работе водородоподобный базис должен быть модифицирован с целью учета степеней свободы ротатора. Собственными функциями гамильтониана (2) являются сферические гармоники $Y_{JM}(\Theta,\Phi)$, а собственные значения есть [13,16]

$$\varepsilon_J^{\text{rot}} = \mathcal{B}J(J+1), \quad J = 0, 1, 2, \ldots. \qquad (5)$$

Таким образом, базис для точной диагонализации должен быть набран из прямых произведений

$$|JM\rangle|n_a l_a m_a\rangle|n_b l_b m_b\rangle =$$

$$= Y_{JM}(\Theta,\Phi)\psi_{n_a,l_a,m_a}(\alpha\mathbf{r}_a)\psi_{n_b,l_b,m_b}(\alpha\mathbf{r}_b), \qquad (6)$$

отвечающих всем возможным допустимым комбинациям квантовых чисел J, M, n_a, l_a, m_a, n_b, l_b, m_b [9].

Здесь

$$\psi_{nlm}(\alpha_\mathbf{r}) = R_{nl}(\alpha r)Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \equiv nlm\rangle \qquad (7)$$

есть водородоподобная волновая функция в центральном поле с эффективным зарядом α [9,20,24].

Ключевым моментом процедуры точной диагонализации является вычисление матричных элементов гамильтониана (1) в базисе (6). Такой расчет удобно провести в два этапа, вычислив сначала свертку по состояниям $Y_{JM}(\Theta,\Phi)$ пространственного ротатора. Таким образом, рассмотрим редуцированный гамильтониан

$$\tilde{H}_{L_1M_1L_2M_2} = \langle Y_{J_1M_1}(\Theta,\Phi)|H(\Theta,\Phi,\mathbf{r}_a,\mathbf{r}_b)|Y_{J_2M_2}(\Theta,\Phi)\rangle. \qquad (8)$$

При этом слагаемое $H^{(\text{nucl})}$ в (1) дает энергию свободного ротатора (5) при $J = J_1 = J_2$. Основное состояние ротатора $J = 0$ соответствует нулевой энергии вращательного движения, а первое возбужденное состояние есть $\varepsilon_1^{\text{rot}} = 2B$. Значение вращательной константы ядра можно оценить, полагая момент инерции ротатора равным $I \sim M_p d^2/2$, где $d \sim 1{,}5\cdot10^{-13}$ см $=$ $= 2{,}84\cdot10^{-5}$ a_B ($a_B = 0{,}529\cdot10^{-8}$ см — боровский радиус), $M_p = 1837m_e$ — масса протона. В результате $\mathcal{B} = \hbar^2/M_p d^2 = 18{,}37$ МэВ, и, следовательно, энергия первого вращательного уровня превышает энергию связи в ядре. Таким образом, по вращательным переменным ядро всегда находится в основном состоянии, так что при построении базиса (6) необходимо ограничиться основным вращательным состоянием $J = M = 0$, собственная функция которого есть константа $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$. После этого формула (8) приобретает вид (матричные индексы за ненадобностью опускаем)

$$\tilde{H} = -\frac{1}{2}\Delta_a - \frac{1}{2}\Delta_b + \frac{1}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|} - 2\Gamma_0\left(r_a,\frac{d}{2}\right) - 2\Gamma_0\left(r_b,\frac{d}{2}\right), \qquad (9)$$

причем

$$\Gamma_0\left(r,\frac{d}{2}\right) = \begin{cases} \frac{1}{r} & \text{for} \quad r > \frac{d}{2} \\ \frac{2}{d} & \text{for} \quad r < \frac{d}{2} \end{cases}. \qquad (10)$$

Гамильтониан (9) теперь в точности описывает два взаимодействующих электрона в центральном поле, однако отличается от стандартной формулировки [9] тем, что центральное поле создается не точечным источником, а сферой радиуса $d/2$, внутри которой ($r < d/2$) потенциал сохраняет постоянное значение $2\mathcal{Z}e^2/d$. Таким образом ядро оказывается точным аналогом проводящей сферы, в центре которой помещен положительный заряд $\mathcal{Z}e$, причем $\mathcal{Z} = +2$. Интересно отметить, что аналогичная модель была предложена в 1926 году Гайзенбергом [25] при учете взаимодействия двух электронов в пределах электронной оболочки атома гелия (ядро при этом предполагалось точечным). Не вдаваясь в подробности, укажем только, что модель [25] является феноменологическим приемом, использованным для оценки межэлектронного отталкивания в рамках теории возмущений, в то время как результат (9) в пределах выбранной модели можно считать точным, а уравнение Шредингера с таким гамильтонианом допускает построение решения для электронных состояний в рамках процедуры точной диагонализации. Для этого удобно переписать гамильтониан (9) следующим образом:

$$\tilde{H} = -\frac{1}{2}\Delta_a - \frac{1}{2}\Delta_b - \frac{2}{r_a} - \frac{2}{r_b} + \frac{1}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|} + U(r_a) + U(r_b). \tag{11}$$

Здесь первые пять слагаемых в точности соответствуют атому гелия с точечным ядром, а $U(r)$ есть короткодействующий потенциал отталкивания, связанный с конечным размером ядра,

$$U(r) = \begin{cases} 0 & \text{if} \quad r > \dfrac{d}{2} \\ 2\left(\dfrac{1}{r} - \dfrac{2}{d}\right) & \text{if} \quad r < \dfrac{d}{2} \end{cases}. \tag{12}$$

В результате, в качестве базиса для точной диагонализации можно непосредственно использовать собственные векторы состояний двухэлектронной оболочки, построенные в работе [9]. Фактически нас будет интересовать только поправка к основному состоянию, так что потребуется единственный матричный элемент (здесь мы сохраняем обозначения работы [9]),

$$\delta\varepsilon_1 = \langle \Psi_{(1)}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) \,|\, U(r_a) + U(r_b) \,|\, \Psi_{(1)}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) \rangle, \tag{13}$$

где волновая функция основного состояния бесспинового атома гелия имеет вид [9]

$$\Psi_{(1)}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = C_1 u_1(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) - C_2[u_2(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) + u_3(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)] - C_3 u_{10}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) - C_4 u_{17}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) + C_4[u_{23}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) + u_{24}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)], \tag{14}$$

причем

$$u_p(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = \psi_{n_a l_a m_a}(\alpha r_a, \vartheta_a, \varphi_a)\psi_{n_b l_b m_b}(\alpha r_b, \vartheta_b, \varphi_b) \equiv \left| \begin{matrix} n_a & l_a & m_a \\ n_b & l_b & m_b \end{matrix} \right\rangle, \tag{15}$$

где ψ_{nlm} — водородоподобные функции (7) и, соответственно,

$$u_1(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = u_{100}(\alpha \mathbf{r}_a) u_{100}(\alpha \mathbf{r}_b) \equiv \left| \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{matrix} \right\rangle.$$

$$u_2(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = \left| \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \end{matrix} \right\rangle, \quad u_3(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = \left| \begin{matrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{matrix} \right\rangle,$$

$$u_{10}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = \left| \begin{matrix} 2 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \end{matrix} \right\rangle, \quad u_{17}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = \left| \begin{matrix} 2 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \end{matrix} \right\rangle,$$

$$u_{23}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = \left| \begin{matrix} 2 & 1 & -1 \\ 2 & 1 & 1 \end{matrix} \right\rangle, \quad u_{24}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = \left| \begin{matrix} 2 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & -1 \end{matrix} \right\rangle. \tag{16}$$

Численные значения коэффициентов C_i равны: $C_1 = 0{,}91428$, $C_2 = 0{,}0892$, $C_3 = 0{,}0223$, $C_4 = 0{,}0145$ [9].

Таким образом, для нахождения (13) вычисляем матричные элементы

$$\langle n_1 l_1 m_1 \,|\, U(r) \,|\, n_2 l_2 m_2 \rangle = -4d\alpha^2 \mathcal{I}_0(n_1, l_1 \,|\, n_2, l_2)\delta_{l_1 l_2}\delta_{m_1 m_2} < 0, \tag{17}$$

где δ_{ik} — символ Кронекера, а I_0 — численный коэффициент, равный

$$\mathcal{I}_0(n_1, l_1 \,|\, n_2, l_2) = \frac{1}{n_1 n_2}\left(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}\right)^2 \left(\frac{2}{n_1}\right)^{l_1} \left(\frac{2}{n_2}\right)^{l_2} \sqrt{\nu_1!\nu_2!}\sqrt{\tau_1!\tau_2!} \times \sum_{k_1=0}^{\tau_1}\sum_{k_2=0}^{\tau_2} \frac{(-1)^{k_1+k_2}}{k_1!k_2!}\left(\frac{2}{n_1}\right)^{k_1}\left(\frac{2}{n_2}\right)^{k_2} \frac{(l_1+l_2+k_1+k_2+2)!}{\left(\dfrac{1}{n_1}+\dfrac{1}{n_2}\right)^{l_1+l_2+k_1+k_2+3}} \times \frac{1}{((\tau_1-k_1)!(\tau_2-k_2)!(\nu_1-\tau_1+k_1)!(\nu_2-\tau_2+k_2)!} \tag{18}$$

(см. также формулу (43) из работы [9]). В формуле (18) использованы следующие обозначения:

$$\tau_1 = n_1 - l_1 - 1, \ \tau_2 = n_2 - l_2 - 1, \quad \nu_1 = n_1 + l_1, \ \nu_2 = n_2 + l_2.$$

В результате искомая поправка может быть представлена в виде

$$\delta\varepsilon_1^{\text{nucl}} = -8d\alpha^2\Big[(C_1^2 + C_2^2)\mathcal{I}_0(1,0|1,0) + 2(C_1C_3 + C_2C_3 - 2C_1C_2)\mathcal{I}_0(1,0|2,0) + (C_2^2 + C_3^2)\mathcal{I}_0(2,0|2,0) + 2C_4^2\mathcal{I}_0(2,1|2,1)\Big] = -2{,}576d\alpha^2. \tag{19}$$

Выражение (19) получено в нижайшем (линейном по $d \ll 1$) приближении. Замечательно то, что главный член поправки оказывается линейным по d, в то время как квадрупольное слагаемое в потенциале взаимодействия электронов с ядром (уравнение (3)) имеет порядок $\sim d^2$. Кроме того, эта поправка оказывается отрицательной, так что ее учет понижает энергию основного состояния. С учетом приведенных выше оценок для d, а также найденного в [9] значения $\alpha = 1,7677$, находим, что в атомных единицах величина этой поправки составляет

$$\delta\varepsilon_1^{\text{nucl}} \simeq -2,29 \cdot 10^{-4}, \tag{20}$$

т.е. около трех сотых процента от энергии основного состояния $\varepsilon_1 = -2,85688286$ [9]. Абсолютное значение этой поправки равно 6,231 мэВ. Важно подчеркнуть, что учет размеров ядра сдвигает электронный спектр как целое, но не приводит к возникновению отдельных низколежащих уровней. Как легко видеть, (20) практически совпадает с приведенной в начале статьи грубой оценкой эффекта конечной массы ядра $\delta\varepsilon_1^{\text{tr}} \simeq 2m_e/M_{\text{nuc}}$. Чтобы окончательно уяснить количественный вклад поправки от размера ядра, ниже сравним ее с результатом строгого расчета поправки за счет движения ядра конечной массы.

3.2. Конечная масса ядра

Нахождение поправок $\delta\varepsilon_1^{\text{tr}}$, связанных со вкладом трансляционных степеней свободы ядра, представляет собой в действительности не вполне тривиальную задачу. Простая качественная оценка, согласно которой спектр смещается на величину, пропорциональную отношению $2m_e/M_{\text{nuc}}$, исходит из того, что рассматривается система двух тел с массами $2m_e$ и M_{nuc}, движущегося вокруг общего центра инерции. В действительности же два электрона оболочки в основном состоянии, стремясь минимизировать энергию взаимного отталкивания, располагаются как можно дальше друг от друга, то есть преимущественно вблизи противоположных концов общего диаметра, проходящего через центр атома. Таким образом, конфигурация атома гелия, в принципе, должна рассматриваться как задача трех тел. В системе центра инерции гамильтониан двухэлектронной оболочки в поле точечного ядра с зарядом $Z = +2$ и массой M_{nuc} приобретает вид [19,20]

$$\mathcal{H} = \hat{H}_0 + \gamma\hat{V}, \tag{21}$$

где

$$\hat{H}_0 = -\frac{1}{2}\Delta_a - \frac{1}{2}\Delta_b - \frac{2}{r_a} - \frac{2}{r_b} + \frac{1}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|}, \tag{22}$$

есть гамильтониан двухэлектронного атома при $M_{\text{nuc}} = \infty$,

$$\hat{V} = -\frac{1}{2}\Delta_a - \frac{1}{2}\Delta_b - \nabla_a\nabla_b, \tag{23}$$

а $\gamma\hat{V}$ представляет собой возмущение, малое в меру малости отношения $\gamma = m_e/M_{\text{nuc}} = 1,37 \cdot 10^{-4} \ll 1$. При этом $\mathbf{r}_a$ и $\mathbf{r}_b$ есть координаты соответствующих электронов, отсчитанные от точки, в которой находится ядро.

Поскольку речь идет о заведомо малой поправке, для ее вычисления диагонализуем гамильтониан (21) в укороченном базисе, состоящем только из первых четырех функций набора (16): $u_1(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)$, $u_2(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)$, $u_3(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)$ и $u_4(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)$. Соответствующая процедура дает поправки к первым четырем нижайшим состояним атома гелия [9], из которых нас интересует здесь только поправка к основному состоянию парагелия, равная

$$\delta\varepsilon_1^{\text{tr}} \simeq -0,289439 \cdot 10^{-4}. \tag{24}$$

Как видно, ее значение оказывается на порядок меньше грубой оценки, приведенной выше в разд. 2, и в четыре раза меньше более точных оценок, полученных в [19]. Это обстоятельство связано с тем, что расчет методом точной диагонализации правильно воспроизводит конфигурацию электронной оболочки атома гелия в основном состоянии [9]. И, конечно, заслуживает внимания тот факт, что поправка (20) к основному состоянию, происходящая от размера ядра, в восемь раз превосходит поправку (24) из-за конечности его массы.

4. Заключение

Поправки, рассчитанные в работе, понижают основное состояние электронного спектра ^{4}He, но не приводят к возникновению каких-либо новых низколежащих уровней, тем более двукратно вырожденных, что необходимо для существования эффекта Штарка, наблюдаемого в эксперименте. Таким образом, внутренние степени свободы ядра должны быть исключены из числа возможных причин радиочастотного поглощения в сверхтекучем гелии. На этих же основаниях следует отклонить гипотезу о внутренней структуре электрона как дополнительном механизме, влияющем на атомный спектр гелия. Действительно, если даже допустить, что распределение заряда электрона оказывается не сферически симметричным, электрон должен иметь не дипольный (как это постулируется в [12]), а квадрупольный (как у дейтрона) момент. Такой квадрупольный момент, если бы он действительно существовал, должен был бы проявиться, например, в процессах рассеяния электронов. Но даже если бы электрон и обладал бы каким-то электрическим моментом, и, следовательно, вращательными степенями свободы, эти степени свободы не могли бы привести к появлению каких-либо вырожденных низкоэнергетических уровней в атомном спектре по тем же причинам, по которым такие уровни не возникают из-за вращательных степеней свободы ядра. Таким образом, можно заключить, что проблема низкоэнергетических возбуждений в гелии пока еще далека от разрешения, однако работы этого направления (как теоретические, так и, прежде всего, экспериментальные) должны быть продолжены.

1. А.С. Рыбалко, *ФНТ* **30**, 1321 (2004) [*Low Temp. Phys.* **30**, 994 (2004)].
2. А.С. Рыбалко, С.П. Рубец, *ФНТ* **31**, 820 (2005) [*Low Temp. Phys.* **31**, 623 (2005)].
3. A. Rybalko, S. Rubets, E. Rudavskii, V. Tikhy, S. Tarapov, R. Golovashchenko, and V. Derkach, *Phys. Rev. B* **76**, 140503 (2007).
4. A. Rybalko, S. Rubets, E. Rudavskii, V. Tikhy, V. Derkach, and S. Tarapov, *J. Low Temp. Phys.* **148**, 527 (2007).
5. А.С. Рыбалко, С.П. Рубец, Э.Я. Рудавский, В.А. Тихий, С.И. Тарапов, Р. Головащенко, В.Н. Деркач, *ФНТ* **34**, 326 (2008) [*Low Temp. Phys.* **34**, 254 (2008)].
6. А.С. Рыбалко, С.П. Рубец, Э.Я. Рудавский, В.А. Тихий, С.И. Тарапов, Р. Головащенко, В.Н. Деркач, *ФНТ* **34**, 631 (2008) [*Low Temp. Phys.* **34**, 497 (2008)].
7. А.С. Рыбалко, С.П. Рубец, Э.Я. Рудавский, В.А. Тихий, Ю. Полуэктов, Р. Головащенко, В.Н. Деркач, С.И. Тарапов, О.В. Усатенко, *ФНТ* **35**, 1073 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 837 (2009)].
8. A. Rybalko, S. Rubets, E. Rudavskii, V. Tikhiy, Y. Poluectov, R. Golovashchenko, V. Derkach, S. Tarapov, and O. Usatenko, *J. Low Temp. Phys.* **158**, 244 (2010).
9. T.N. Antsygina and K.A. Chishko, *Fiz. Nizk. Temp.* **40**, 1035 (2014) [*Low Temp. Phys.* **40**, 807 (2014)].
10. А.М. Косевич, *ФНТ* **31**, 50 (2005) [*Low Temp. Phys.* **31**, 37 (2005)].
11. А.М. Косевич, *ФНТ* **31**, 1100 (2005) [*Low Temp. Phys.* **31**, 839 (2005)].
12. J.J. Hudson, B.E. Sauer, M.R. Tarbutt, and E.A. Hinds, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 023003 (2002).
13. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1974) [L.D. Landau, and E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics. Nonrelativistic Theory*, Pergamon Press (1965)].
14. А.С Давыдов, *Теория атомного ядра*, ГИФМЛ, Москва (1958).
15. О. Бор, Б. Моттельсон, *Структура атомного ядра*, Мир, Москва (1971), т. 1 [A. Bohr and B.R. Mottelson, *Nuclear Structure*, New York (1969)].
16. А. Мессиа, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1979), т. 2 [A. Messiah, *Quantum Mechanics* II, North Holland, Amsterdam (1961)].
17. М. Борн, *Атомная физика*, Мир, Москва (1965) [M. Born, Atomic Physics, Blackie and Son, Ltd., London (1963)].
18. Г. Бете, *Теория ядерной материи*, Мир, Москва (1974) [H.A. Bethe, *Theory of Nuclear Matter*, California, USA (1971)].
19. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, ГИФМЛ, Москва (1960). [H.A. Bethe and E.E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two-electron Atoms*, Plenum, NY (1977)].
20. З. Флюгге, *Задачи по квантовой механике*, Мир, Москва (1974), т. 1 [S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics*, Springer (1971), Vol. 1].
21. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц *Теория поля*, Наука, Москва (1967), т. 2 [L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics*, Butterworth-Heinemann (1987), Vol. 2].
22. О. Бор, *УФН* **120**, 543 (1976).
23. Б. Моттельсон, *УФН* **120**, 563 (1976).
24. П. Гомбаш, *Проблема многих частиц в квантовой механике*, Изд-во иностр. лит., Москва (1953) [P. Gombaś, *Theorie und Lösungsmethoden des Mehrteilchenproblems der Wellenmechanik*, Basel (1950)].
25. W. Heisenberg, *Z. Phys.* **39**, 499 (1926).

Effect of nucleus structure on the helium atom electronic spectrum

T.N. Antsygina and K.A. Chishko

Finite nuclear mass and finite nuclear size corrections to the ground state energy of ^{4}He atom have been calculated through exact diagonalization procedure with ^{4}He nucleus interpreted as a bound state of two deuterons within nuclear shell model. Measured experimentally deuteron quadrupole moment ($Q_0 = 2.74\cdot10^{-27}$ cm^2) makes us possible to estimate the size of individual deuteron and, hence, the ^{4}He nuclear diameter $d \sim 1.5\cdot10^{-13}$ cm. As a result, the ^{4}He nucleus consists of four nucleons within the ground state $(1s)^4$ on a spherically symmetric shell, and the total charge of the nucleus equal to $+2e$ uniformly distributed over the shell. On the other hand, such the distribution can be obtained as the ground state of a rigid rotator with two charges $+e$ at opposite ends. According to this model, the nucleus behaves like a charged spherical shell with finite potential $4e/d$ inside the shell and standard Coulomb potential $2e/r$ outside it ($r < d/2$). The presence of such “core” leads to the correction which reduces the ground state energy of ^{4}He atom by the small value, but does not introduce any additional low energy levels. This value is comparable to the ground state correction due to the finite mass of the ^{4}He nucleus.

PACS: *31.15.ac* High-precision calculations for few-electron (or few-body) atomic systems.

Keywords: atom ^{4}He, correction to the spectrum of ^{4}He.