О.О. ЄРЕМКО, Л.С. БРИЖИК, В.М. ЛОКТЄВ

Інститут теоретичної фізики ім. Боголюбова НАН України
(Вул. Метрологічна, 14-б, Київ 03143)

УДК 530.1, 538.9

ДО ТЕОРІЇ ЛЕМБІВСЬКОГО ЗСУВУ В РЕЛЯТИВІСТСЬКОМУ АТОМІ ВОДНЮ

Радіаційні поправки, які усувають випадкове виродження в спектрі релятивістського атома водню і приводять до модифікації закону Кулона, розраховуються в рамках нового підходу, заснованого на точному розв'язку рівняння Дірака з потенціалом Кулона. З урахуванням цих поправок отримано енергетичний спектр атома водню та розраховано лембівський зсув для найнижчих енергетичних станів.

Ключові слова: рівняння Дірака, релятивістський атом водню, спінорний інваріант, радіаційна поправка, модифікація закону Кулона, зсув Лемба.

1. Вступ

Найбільш адекватний і повний опис електронних станів у полі ядра забезпечує рівняння Дірака (РД) з потенціалом Кулона [1,2]. Суттєвим наслідком релятивістського РД є природна поява спіна електрона. Було показано, що існує тонка структура розщеплення водневоподібних енергетичних рівнів, яка виникає внаслідок спін-орбітальної взаємодії. Остання усуває орбітальну виродженість у нерелятивістському розгляді проблеми в рамках рівняння Шредінгера. Але виявляється, що вона усуває виродження не повністю. Наприклад, згідно з РД, $2S_{1/2}$ та $2P_{1/2}$ стани мають однакову енергію. Це так зване випадкове виродження виникає внаслідок специфічних особливостей кулонівського потенціалу та пояснюється існуванням кількох спінорних інваріантів, а саме, інваріантів Дірака, Джонсона-Ліпмана, та Брижик–Єремка–Локтєва [3], комутатори яких ненульові.

У 1947 році В. Лемб повідомив про несподівану особливість у тонкій структурі атомарного водню: розділення рівнів $2S_{1/2}$ і $2P_{1/2}$, яке відоме нині як зсув Лемба. Це вказує на те, що закон Кулона не виконується на відстанях малих масштабів. Це відкриття стало поштовхом для сучасного розвитку квантової електродинаміки (КЕД). Пояснення зсуву Лемба, а також аномального електронного g-фактора, є історично основними досягненнями КЕД.

У рамках коваріантного формалізму КЕД, заснованого на збуреному розширенні S-матриці, електрон досліджується з урахуванням впливу на нього двох полів, одним з яких є поле власного випромінювання (електрон-фотонної взаємодії), а другим – зовнішнє електромагнітне поле. Перша взаємодія призводить до появи радіаційних поправок (radiative corrections, RCs) до взаємодії електрона із зовнішнім полем, тоді як зовнішній центральний потенціал призводить до появи зв'язаних електронних станів з дискретними енергіями, на які впливають RC. Було показано, що коваріантний формалізм може бути, в принципі, узагальнений і на зв'язані стани, хоча обчислення діаграм Фейнмана вищого порядку є дуже громіздким. Зазвичай теорія збурень використовується з описом зв'язаних станів розв'язками рівняння Шредінгера. Обчислення зсуву Лемба в рамках такої схеми описано в багатьох підручниках з КЕД (наприклад, [4]), а також в оглядах. Тим не менш, важливо, що саме РД забезпечує правильний перехід до нерелятивістської границі. З урахуванням повного набору інваріантів РД, повний набір релятивістських поправок у рівнянні Шредінгера було розраховано в роботах [5, 6]. Таким чином, варто обчислити зсув Лемба з урахуванням цих фактів.

У цій статті ми обчислюємо лембівський зсув у рамках традиційного в квантовій механіці гамільтонівського опису, застосованого до РД. Розв'язу-

Цитування: Єремко О.О., Брижик Л.С., Локтєв В.М. До теорії лембівського зсуву в релятивістському атомі водню. *Укр. фіз. журн.* **69**, №8, 539 (2024).

ючи саме РД з потенціалом Кулона, ми отримуємо релятивістський гамільтоніан атома водню з урахуванням усіх відомих RC, які розраховуються за допомогою точного розв'язку РД. Фактори, що знижують симетрію і виключають додаткові інваріанти з множини інтегралів руху, знімають енергетичне виродження. Одним із таких факторів є відхилення електричного поля, що діє на електрон в атомі, від закону Кулона. RC, що зумовлені взаємодією електрона із зовнішніми полями, підсумовані в наступному розділі.

2. Радіаційні поправки до кулонівського потенціалу

RC розглядалися в підручнику Боголюбова і Ширкова [7] (див. також [8]). До RC відноситься перенормування фотонного і спінорного (електрон-позитронного) полів за рахунок взаємодії між ними, а також поляризація вакууму електричним полем зовнішнього заряду. Якщо бути більш точним, RC по суті виникає з таких основних факторів:

• створення та знищення віртуальних електрон-позитронних пар при поширенні фотона, які можуть бути враховані пропагатором фотонної поляризації (photon polarization, PP);

• народження та анігіляція віртуальних фотонів електроном, що дає внесок у власну енергію (self-energy, SE) електрона;

• залежність енергії вакууму від зовнішніх постійних магнітного та електричного полів, що призводить до електричної та магнітної поляризації вакууму (наприклад, електричним полем точкового заряду).

Щоб обчислити зсув Лемба, розглянемо нижче явні вирази для цих RC.

2.1. Ефективний КЕД потенціал від поляризації фотонів

Внесок, пов'язаний з ефектом PP, може бути виділений після використання деяких методів у $\hat{S}$-матричному формалізмі КЕД. У випадку точкового заряду Ze (наприклад, заряд ядра з Z протонами), електричне поле визначається кулонівським скалярним потенціалом $\varphi_{\mathrm{C}}(r)$. З урахуванням поляризаційних RC, це поле змінюється на "ефективне поле" [8–10]

$$\varphi^{(\mathrm{eff})} = \varphi_{\mathrm{C}} + \frac{1}{4\pi}\mathcal{P}\mathcal{D}\varphi_{\mathrm{C}}, \tag{1}$$

де $\mathcal{P}$ – оператор PP, а $\mathcal{D}$ – пропагатор фотона, який можна взяти в нульовому наближенні. Другий доданок у цьому виразі, $(1/(4\pi))\mathcal{P}\mathcal{D}\varphi_{\mathrm{C}} \equiv \delta\varphi_{\mathrm{PP}}$, є відповідною поправкою PP до кулонівського потенціалу. У координатному просторі для атома водню ($Z=1$), який ми розглянемо нижче, він має вигляд [8, 9]

$$\delta\varphi_{\mathrm{PP}}(r) = \frac{2\alpha}{3\pi}\frac{e}{r}\int\limits_1^\infty e^{-\frac{2mcr}{\hbar}\zeta}\left(1+\frac{1}{2\zeta^2}\right)\frac{\sqrt{\zeta^2-1}}{\zeta^2}d\zeta, \tag{2}$$

де $e>0$ – елементарний заряд (відповідно, заряд електрона дорівнює $-e$), а $\alpha = e^2/(\hbar c) \approx 1/137$ – стала тонкої структури Зоммерфельда. Потенціал (2) названий на честь Улінга (E.A. Uehling), який першим розрахував його в 1935 році для точкового заряду [11]. Для двох граничних випадків цю поправку можна представити як [8, 9] (див. також [12])

$$\delta\varphi_{\mathrm{PP}}(r) = \begin{cases} \dfrac{2\alpha}{3\pi}\left(\ln\dfrac{\lambda_{\mathrm{C}}}{r} - C - \dfrac{5}{6}\right)\dfrac{e}{r} & (r \ll \lambda_{\mathrm{C}}), \\ \dfrac{\alpha}{4\sqrt{\pi}}e^{-2r/\lambda_{\mathrm{C}}}\left(\dfrac{\lambda_{\mathrm{C}}}{r}\right)^{3/2}\dfrac{e}{r} & (r \gg \lambda_{\mathrm{C}}). \end{cases} \tag{3}$$

Тут $\lambda_c = h/(mc)$ – це комптонівська довжина хвилі, яка відіграє роль характерної довжини для просторової поведінки поправок PP, яка експоненціально зменшується при $r > \lambda_c$.

2.2. Ефективний КЕД потенціал від власної енергії електрона

У КЕД, взаємодія вільного електрона із зовнішнім джерелом потенціалу описується членом $-e\gamma^\mu A_\mu^{(e)}(q)$, де $q = p_2 - p_1$ – обмін чотириімпульсом. Він містить множник $-e\gamma^\mu$, пов'язаний з кожною точкою простору–часу (вершиною), де γ^μ $(\mu = 0,1,2,3)$ є матриці Дірака. Відповідне розкладання S-матриці можна комбінувати за допомогою підстановки

$$\gamma^\mu \to \Gamma^\mu = \gamma^\mu + \Lambda_R^\mu(p_1, p_2).$$

Тут

$$\Lambda_R^\mu(q) = \gamma^\mu F_1(q^2) + i\frac{\sigma^{\mu\nu}q_\nu}{2mc}F_2(q^2), \tag{4}$$

де

$$\sigma^{\mu\nu} = \frac{1}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu],$$

є регуляризованою (фізичною) функцією вершинної корекції [8], яка вносить поправку від власної енергії випромінювання в ефективну взаємодію електрона із зовнішнім полем, $-e\Gamma^{\mu} A_{\mu}^{(\mathrm{ext})}(q)$. У формулі (4), функції F_1 і F_2 відомі як електричні та магнітні формфактори, відповідно.

Використовуючи той факт, що ефективна взаємодія знаходиться між операторами поля вільного електрона (на масовій оболонці) $\bar{u}_{p_1}$ і u_{p_2}, поле зовнішнього точкового заряду $A_0^{(\mathrm{ext})} = \varphi_{\mathrm{C}}$ генерує потенціал корекції вершин $\delta V_{\mathrm{SE}}(\mathbf{q}) = -e\delta\varphi_{\mathrm{SE}}(\mathbf{q})$ у формі

$$\delta\varphi_{\mathrm{SE}}(\mathbf{q}) = \Lambda_R^0(\mathbf{q})\varphi_{\mathrm{C}}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e}{\mathbf{q}^2}\Lambda_R^0(\mathbf{q}),$$

що є сумою електричних і магнітних поправок до потенціалу Кулона, $\delta\varphi_{\mathrm{SE}}(\mathbf{r}) = \delta\varphi_{\mathrm{elec}}(\mathbf{r}) + \delta\varphi_{\mathrm{mag}}(\mathbf{r})$, що відповідає відповідним формфакторам.

Оскільки вершинна функція залежить лише від переданого імпульсу $\mathbf{q}$, вона дозволяє зручно отримати локальний потенціал у реальному просторі. У координатному просторі електричний формфактор дає корекцію до скалярного потенціалу

$$\delta\varphi_{\mathrm{elec}}(r) = -\frac{e_e\alpha}{2\pi r}\int\limits_1^{\infty} d\zeta\; e^{-\frac{2\zeta r}{\lambda_{\mathrm{C}}}} \times$$
$$\times \frac{-3\zeta^2 + 2 + \left(2\zeta^2 - 1\right)\ln\frac{4^2 m^2}{\lambda^2}\left(\zeta^2 - 1\right)}{\zeta^2\sqrt{\zeta^2 - 1}}. \qquad (5)$$

Магнітний формфактор призводить до корекції у формі

$$\delta\varphi_{\mathrm{mag}}(\mathbf{r}) = \frac{e\alpha\lambda_{\mathrm{C}}}{4\pi}\frac{d\phi(r)}{dr}\hat{\mathbf{\Gamma}}\cdot\mathbf{e}_{\mathbf{r}}, \qquad (6)$$

де

$$\phi(r) = \frac{1}{r}\left(1 - \int\limits_1^{\infty} e^{-2r\zeta/\lambda_{\mathrm{C}}}\frac{d\zeta}{\zeta^2\sqrt{\zeta^2-1}}\right), \qquad (7)$$

$$\hat{\mathbf{\Gamma}} = \begin{pmatrix} 0 & -i\hat{\boldsymbol{\sigma}} \\ i\hat{\boldsymbol{\sigma}} & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{r},$$

$\hat{\sigma}_{\mathbf{r}} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{e}_{\mathbf{r}}$, а $\hat{\sigma}_j$ $(j = x, y, z)$ – це матриці Паулі,

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \qquad (8)$$

Ці ефективні потенціали власної енергії були вперше отримані для точкового ядра (потенціал Кулона) [13, 14].

Як випливає з рівнянь (6) та (7), подібно до поправок РР, комптонівська довжина хвилі λ_{C} тут також відіграє роль показника просторового згасання RC.

2.3. Ефективний КЕД потенціал від поляризації вакууму

Квантування електроно-позитронного поля призводить до появи нескінченної константи $E_{\mathrm{vac}} = -\sum_{\mathbf{p},\sigma} E_{\mathbf{p}}^{(-)}$, де значення $-E_{\mathbf{p}}^{(-)}$ є від'ємними власними значеннями РД. Ця константа інтерпретується як енергія вакууму, від якої відраховуються енергії збуджень спінорного поля. За наявності постійного електромагнітного поля, енергії $E_{\mathbf{p}}^{(-)}$ зміщуються, що призводить до залежності властивостей простору від поля та змінює рівняння електромагнітного поля у вакуумі. Це перетворює лінійні рівняння Максвелла в нелінійні та призводить до появи спостережуваних ефектів, таких як розсіювання світла світлом або зовнішнім полем. В. Гейзенберг і Г. Ейлер [15] були першими, хто дослідив це явище в рамках формалізму густини Лагранжа (див. також [16]). В результаті, рівняння Максвелла у вакуумі набувають вигляду макроскопічних рівнянь для поля в матеріальному середовищі,

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\mathcal{E}} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{\mathcal{B}}}{\partial t}, \quad \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\mathcal{B}} = 0, \\ &\boldsymbol{\nabla}\cdot(\boldsymbol{\mathcal{B}} - 4\pi\boldsymbol{\mathcal{M}}) = \frac{\partial}{\partial t}(\boldsymbol{\mathcal{E}} + 4\pi\boldsymbol{\mathcal{P}}), \\ &\boldsymbol{\nabla}\cdot(\boldsymbol{\mathcal{E}} + 4\pi\boldsymbol{\mathcal{P}}) = 0, \end{aligned} \qquad (9)$$

де

$$\boldsymbol{\mathcal{P}} = \frac{\partial\Delta L}{\partial\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \quad \boldsymbol{\mathcal{M}} = \frac{\partial\Delta L}{\partial\boldsymbol{\mathcal{B}}}$$

є векторами електричної та магнітної, відповідно, поляризації вакууму [8, 9]. Тут ΔL – змінна функціонала Лагранжа, яка враховує енергію вакууму. У випадку $\boldsymbol{\mathcal{B}} = 0$, вектор $\boldsymbol{\mathcal{P}}$ задається такими виразами:

$$\boldsymbol{\mathcal{P}} = \frac{\partial\Delta L}{\partial\boldsymbol{\mathcal{E}}} = \frac{\hbar^3\alpha^2}{90\pi^2 m^4 c^5}\,\mathcal{E}^2\boldsymbol{\mathcal{E}}.$$

Для центрального симетричного поля маємо $\boldsymbol{\mathcal{E}} = \mathcal{E}(r)\,\mathbf{e}_{\mathbf{r}}$ $(\mathbf{e}_{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/r)$, і з рівняння Максвелла $\boldsymbol{\nabla}\cdot(\boldsymbol{\mathcal{E}} + 4\pi\boldsymbol{\mathcal{P}}) = 0$ випливає, що

$$\mathcal{E} + \frac{2\hbar^3\alpha^2}{45\pi m^4 c^5}\,\mathcal{E}^3 = \frac{e}{r^2}. \qquad (10)$$

Константа інтегрування e у виразі (10) визначається з умови, що при $\alpha \to 0$ поле має збігатися з кулонівським полем елементарного заряду e. Для випадку заряду ядра Ze, задачу легко узагальнити.

Припускаючи те, що поле точкового заряду мало відрізняється від закону Кулона $\mathcal{E}_0(r) = e/r^2$ через малість коефіцієнта α, ми можемо шукати наближений розв'язок нелінійного рівняння (10) у вигляді розкладу $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 + \alpha^2\mathcal{E}_1 + \dots$. Для поправки першого порядку електричного поля отримуємо

$$\mathcal{E}_1 = -\frac{2\hbar^3}{45\pi m^4 c^5}\frac{e^3}{r^6}\left(1 + \frac{2\hbar^3\alpha^2}{15\pi m^4 c^5}\frac{e^2}{r^4}\right)^{-1}.$$

Корисно ввести константу

$$r_0 = \left(\frac{2\alpha^3}{15\pi}\right)^{1/4}\lambda_\mathrm{C} \ll \lambda_\mathrm{C}, \tag{11}$$

яка має розмірність довжини. Тоді електричне поле в першому порядку задається виразом

$$\mathcal{E}(r) = \frac{e}{r^2} + \Delta\mathcal{E}_\mathrm{vac}(r), \tag{12}$$

де

$$\Delta\mathcal{E}_\mathrm{vac}(r) = -\frac{e}{3}\frac{r_0^4}{r^2\left(r^4 + r_0^4\right)}. \tag{13}$$

Для даного електричного поля скалярний потенціал визначається інтегруванням рівності $d\varphi/dr = -\mathcal{E}(r) = -\left(\mathcal{E}_0(r) + \Delta\mathcal{E}_\mathrm{vac}(r)\right)$; отже,

$$\varphi(r) = \varphi_0(r) + \Delta\varphi_\mathrm{vac}(r), \quad \varphi_0(r) = \frac{e}{r},$$
$$\frac{d(\delta\varphi_\mathrm{vac}(r))}{dr} = \frac{e}{3}\frac{r_0^4}{r^2\left(r^4 + r_0^4\right)}.$$

Інтегруючи це рівняння, ми отримуємо поправку на поляризацію вакууму $\delta\varphi_\mathrm{vac}(r)$ до скалярного потенціалу точкового заряду,

$$\delta\varphi_\mathrm{vac}(r) = -\frac{e}{3}\left(\frac{1}{r} + F(r) - \frac{\pi}{2\sqrt{2}r_0}\right), \tag{14}$$

де

$$F(r) = \int\frac{r^2dr}{r^4 + r_0^4} = \frac{1}{2\sqrt{2}r_0}\left[\frac{1}{2}\ln\frac{r^2 - \sqrt{2}r_0 r + r_0^2}{r^2 + \sqrt{2}r_0 r + r_0^2} + \arctan\left(\frac{\sqrt{2}r}{r_0} - 1\right) + \arctan\left(\frac{\sqrt{2}r}{r_0} + 1\right)\right]. \tag{15}$$

Тут константа інтегрування $C = -\pi/\left(2\sqrt{2}r_0\right)$ визначається з граничної умови $\delta\varphi_\mathrm{vac}(r) = 0$ при $r \to \infty$.

З цього наближення випливає, що перший порядок RC $\delta\varphi_\mathrm{vac}(r)$ при $r \gg r_0$ зменшується за степеневим законом $\sim 1/r^5$ (пор. рівняння (3) і (7), де поведінка експоненціальна).

Зауважимо також, що значення $\boldsymbol{\mathcal{P}}$ і $\boldsymbol{\mathcal{M}}$ стають нульовими для плоских електромагнітних хвиль.

3. Ефективний гамільтоніан атома Дірака

У КЕД, РД – це рівняння Ейлера–Лагранжа, яке випливає з мінімізації функціонала дії $S = \int\mathcal{L}d^4x$, де $\mathcal{L}$ – густина Лагранжа, яка залежить від змінних спінорного та електромагнітного полів. Спінорне поле Дірака описується біспінором Ψ і діраківськи-спряженим біспінором $\bar{\Psi} = \Psi^\dagger\hat{\beta}$. Змінною електромагнітного поля є 4-потенціал $\vec{A} = (\varphi, \mathbf{A})$, контраваріантні компоненти якого A^μ ($\mu = 0, 1, 2, 3$) є скалярним, φ, і векторним, $\mathbf{A}$, потенціалами, як зазначено вище.

Функціонал Гамільтона для спінорного поля визначається як

$$\mathrm{H} = \int\left(i\hbar\Psi^\dagger\frac{\partial\Psi}{\partial t} - \mathcal{L}\right)d\mathbf{r} = \int\mathcal{H}d\mathbf{r}, \tag{16}$$

де $\mathcal{H} = \Psi^\dagger(\mathbf{r})\hat{H}_D\Psi(\mathbf{r})$ – густина гамільтоніана, $\hat{H}_D$ є гамільтоніаном Дірака, а просторове інтегрування здійснюється по всьому об'єму. З урахуванням описаних вище RC, гамільтоніан Дірака за наявності потенціалу Кулона $\varphi_\mathrm{C}(\mathbf{r})$, створеного зовнішнім точковим зарядом e, дорівнює

$$\hat{H}_D = c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + mc^2\hat{\beta} - \frac{e^2}{r} + V_\mathrm{RC}(\mathbf{r}). \tag{17}$$

Тут $\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \sum_j \mathbf{e}_j\hat{\alpha}_j$ – векторна матриця, компоненти якої $\hat{\alpha}_j$ ($j = x, y, z$) разом з матрицею $\hat{\beta}$ є ермітовими матрицями Дірака, які в стандартному представленні мають такий вигляд:

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\boldsymbol{\sigma}} \\ \hat{\boldsymbol{\sigma}} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \hat{I}_2 & 0 \\ 0 & -\hat{I}_2 \end{pmatrix}, \tag{18}$$

де $\hat{I}_2$ – це одинична матриця 2×2. Нарешті, потенціал у гамільтоніані Дірака (17) визначається як

$$V_\mathrm{RC}(\mathbf{r}) = -e\delta\varphi_\mathrm{PP}(\mathbf{r}) - e\delta\varphi_\mathrm{elec}(\mathbf{r}) - e\delta\varphi_\mathrm{vac}(\mathbf{r}) - e\delta\varphi_\mathrm{mag}(\mathbf{r}).$$

Біспінор $\Psi(\mathbf{r})$ у рівнянні (16) – це амплітуда спінорного поля Дірака, яку можна розкласти по повній ортонормованій біспінорній системі. Оператор (17) можна представити як $\hat{H}_D = \hat{H}_0 + V_\mathrm{RC}$, де $\hat{H}_0 = c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\,\hat{\mathbf{p}} + mc^2\hat{\beta} - e^2/r$ – гамільтоніан Дірака, що враховує тільки потенціал Кулона. РД з потенціалом Кулона $\hat{H}_0\Psi = E\Psi$ дозволяє точний розв'язок і дає повну ортонормовану систему власних біспінорів і спектр власних значень, який включає сектор позитивних значень $E_{e,\{\nu\}} > 0$ з власними біспінорами $\Psi_{e,\{\nu\}}$ (електрони) і сектор від'ємних значень $E_{p,\{\mu\}} < 0$ з власними біспінорами $\Psi_{p,\{\mu\}}$ (позитрони), які характеризуються власними наборами квантових чисел $\{\nu\}$ і $\{\mu\}$.

Розклад $\Psi(\mathbf{r})$ у рівнянні (16) по цій ортонормованій системі біспінорів

$$\Psi\left(\mathbf{r}\right) = \sum_{\{\nu\}} a_{\{\nu\}} \Psi_{e,\{\nu\}}\left(\mathbf{r}\right) + \sum_{\{\mu\}} b^{\dagger}_{\{\mu\}} \Psi_{p,\{\mu\}}\left(\mathbf{r}\right) \qquad (19)$$

дає релятивістський гамільтоніан (16) у представленні чисел заповнення стаціонарних станів гамільтоніана $\hat{H}_0$, де $a^{\dagger}_{\{\nu\}}$ $(a_{\{\nu\}})$ і $b^{\dagger}_{\{\mu\}}$ $(b_{\{\mu\}})$ є операторами народження (анігіляції) Фермі частинки (електрона) та античастинки (позитрона) у стані з квантовими числами $\{\nu\}$ та $\{\mu\}$, відповідно. Підставляючи вираз (19) у функціонал (16) і виключаючи нескінченну енергію вакуумного стану, ми приходимо до релятивістського позитивно визначеного оператора

$$\mathrm{H} = \mathrm{H}_e + \mathrm{H}_p + \hat{V}_{e-p}. \qquad (20)$$

Тут H_e, H_p, і $\hat{V}_{e-p}$ – гамільтоніани електронів і позитронів, відповідно, у кулонівському потенціалі зі збуренням V_{RC}, а також оператор їх взаємних перетворень за рахунок збурення.

Для будь-якого нерелятивістського збурення, перенормування електронних і позитронних станів мізерно мале, що дозволяє розглядати частинки і античастинки як невзаємодіючі об'єкти. Для позитивного точкового заряду e, від'ємні власні значення $\hat{H}_0$ входять лише до безперервного спектра, а власні стани позитрона є сферичними хвилями. Позитивні власні значення РД визначають енергію електронів, яка включає як безперервний спектр незв'язаних електронів, так і рівні дискретних електронів. Нижче ми розглядаємо лише дискретний спектр. Він характеризується квантовими числами

$$\{\nu\} = n, j, m_j, \sigma, \qquad (21)$$

де

$$n = 1, 2, ..., \quad j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, ..., n - \frac{1}{2}, \qquad m_j = \pm j, \pm(j-1), ..., \pm\frac{1}{2} \qquad (22)$$

є головним квантовим числом, повним кутовим моментом, і його проекцією на полярну вісь, відповідно, а σ є знаком спінорного інваріанту (див. [3]).

Власні біспінори стаціонарних станів зв'язаного електрона в атомі є добре відомими рішеннями Дарвіна, які можна записати як

$$\Psi_{\{\nu\}}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} R^{(\sigma)}_{n,j}(r)\Omega_{j-\sigma(1/2),m_j,\sigma}(\vartheta,\varphi) \\ i\lambda_{n,j}Q^{(-\sigma)}_{n,j}(r)\hat{\sigma}_r\Omega_{j-\sigma(1/2),m_j,\sigma}(\vartheta,\varphi) \end{pmatrix}, \qquad (23)$$

де $\Omega_{j\mp1/2,m_j,\pm}$ – сферичні спінори, функції $R^{(\pm)}_{n_r,j}$ і $G^{(\mp)}_{n_r,j}$ – радіальні функції, явні вирази яких обчислюються в [17], а параметр $\lambda_{n,j} \ll 1$ вказує на малість нижнього спінора в біспінорі $\Psi_{n,j,m_j,\sigma}$ (див. нижче). Відповідно до повного набору інтегралів руху, ці біспінори характеризуються квантовими числами (21), (22), де $\sigma = \pm$ вказує на стани з позитивним або негативним (дорівнює $\sigma\kappa_j \equiv \sigma(j+1/2)$) власним значенням інваріанта Дірака.

Рівні атомів водню задаються виразом

$$\varepsilon_{n,j} = \sqrt{1 - \frac{\alpha^2}{\mathcal{N}^2_{n,j}}} = \frac{n - \Delta_j}{\mathcal{N}_{n,j}}, \qquad (24)$$

де

$$\mathcal{N}_{n,j} = \sqrt{\left(n - \Delta_j\right)^2 + \alpha^2}, \qquad (25)$$

$$\Delta_j = \kappa_j - \gamma_\kappa = \frac{\alpha^2}{\kappa_j + \gamma_\kappa}, \qquad (26)$$

$$\gamma_\kappa = \sqrt{\kappa_j^2 - \alpha^2}, \quad \kappa_j = j + \frac{1}{2}. \qquad (27)$$

Тут Δ_j – це величина розщеплення мультиплетів тонкої структури, яке зазвичай розглядається як таке, що виникає внаслідок спін-орбітальної взаємодії. Параметр

$$\lambda_{n,j} = \sqrt{\frac{1 - \varepsilon_{n,j}}{1 + \varepsilon_{n,j}}} = \frac{\alpha}{\mathcal{N}_{n,j} + n - \Delta_j} \qquad (28)$$

у біспінорі (23) визначає співвідношення між верхнім і нижнім спінорами біспінора Дірака.

Отже, гамільтоніан зв'язаних станів атома Дірака дорівнює

$$\mathrm{H} = \sum_{n,j,m_j,\sigma} E_{n,j} a^{\dagger}_{n,j,m_j,\sigma} a_{n,j,m_j,\sigma} + \qquad (29)$$

$$+ \sum_{\{\nu\},\{\nu'\}} V_{\{\nu\},\{\nu'\}} a^{\dagger}_{\{\nu\}} a_{\{\nu'\}}, \qquad (30)$$

де $E_{n,j} = mc^2\varepsilon_{n,j}$ та

$$V_{\{\nu\},\{\nu'\}} = \int \Psi^{\dagger}_{\{\nu\}}(\mathbf{r}) V_{\mathrm{RC}}\left(\mathbf{r}\right) \Psi_{\{\nu'\}}(\mathbf{r}) d^3r \qquad (31)$$

є матричними елементами RC.

4. Матричні елементи радіаційних поправок (RC)

RC у рівнянні (17) можна представити як суму двох доданків,

$$V_{\mathrm{RC}}(\mathbf{r}) = V^{(1)}(\mathbf{r}) + V^{(2)}(\mathbf{r}),$$

де

$$V^{(1)}(\mathbf{r}) = -e\delta\varphi_{\mathrm{PP}}(r) - e\delta\varphi_{\mathrm{elec}}(r) - e\delta\varphi_{\mathrm{vac}}(r) \equiv$$
$$\equiv V_{\mathrm{PP}}(r) + V_{\mathrm{elec}}(r) + V_{\mathrm{vac}}(r) \equiv V^{(1)}(r)$$

(див. рівняння (2), (5), і (14)), а

$$V^{(2)}(\mathbf{r}) = -\frac{e^2\alpha\lambda_{\mathrm{C}}}{4\pi}\frac{d\phi\,(r)}{dr}\,\hat{\mathbf{\Gamma}}\times\mathbf{e_r} \equiv$$
$$\equiv V_{\mathrm{mag}}(\mathbf{r}) = V^{(2)}(r)\,\hat{\mathbf{\Gamma}}\times\mathbf{e_r}$$

включає поправку від магнітного електронного формфактора (6).

Збурення $V^{(1)}(\mathbf{r}) = V^{(1)}(r)$ – це скалярний потенціал, матричні елементи якого дорівнюють

$$V^{(1)}_{\{\nu\},\{\nu'\}} = \int V^{(1)}(r)\Psi^{\dagger}_{\{\nu\}}(\mathbf{r})\,\Psi_{\{\nu'\}}(\mathbf{r})d^3r =$$
$$= \int d\varphi\sin\vartheta d\vartheta r^2 dr V^{(1)}(r)\left[R^{(\sigma)}_{n,j}(\rho)R^{(\sigma')}_{n',j'}(\rho') +\right.$$
$$\left.+\,\lambda_{n,j}\lambda_{n',j'}Q^{(-\sigma)}_{n,j}(\rho)Q^{(-\sigma')}_{n',j'}(\rho')\right]\times$$
$$\times\,\Omega^{\dagger}_{j-\sigma 1/2,m_j,\sigma}\,(\vartheta,\varphi)\,\Omega_{j'-\sigma' 1/2,m'_j,\sigma'}\,(\vartheta,\varphi).$$

Оскільки сферичні спінори є ортогональними, матричні елементи в гамільтоніані (29) є діагональними: $V^{(1)}_{\{\nu\},\{\nu'\}} = V^{(1)}_{j,\sigma;n,n'}\delta_{j',j}\delta_{m'_j,m_j}\delta_{\sigma',\sigma}$.

Відповідно до (6), матричні елементи збурення $V_2(\mathbf{r})$ дорівнюють

$$V^{(2)}_{\{\nu\},\{\nu'\}} = \int \Psi^{\dagger}_{\{\nu\}}(\mathbf{r})\Phi(r)\,\hat{\mathbf{\Gamma}}\times\mathbf{e_r}\Psi_{\{\nu'\}}(\mathbf{r})\,d^3r =$$
$$= \int V^{(2)}(r)\left[\lambda_{n',j'}Q^{(\sigma)}_{n,j}(\rho)R^{(-\sigma')}_{n',j'}(\rho') +\right.$$
$$\left.+\,\lambda_{n,j}Q^{(-\sigma)}_{n,j}(\rho)R^{(\sigma')}_{n',j'}(\rho')\right]\times$$
$$\times\,\Omega^{\dagger}_{j-\sigma 1/2,m_j,\sigma}\,(\vartheta,\varphi)\,\Omega_{j'-\sigma' 1/2,m'_j,\sigma'}\,(\vartheta,\varphi)\;\; d^3r =$$
$$= V^{(2)}_{j,\sigma;n,n'}\delta_{j',j}\delta_{m'_j,m_j}\delta_{\sigma',\sigma}.$$

Вони також є діагональними відповідно до чисел j, m_j, σ.

Отже, гамільтоніан зв'язаних станів водню з урахуванням RC має вигляд

$$\mathrm{H} = \sum_{n,j,m_j,\sigma}(E_{n,j} + V_{n,j,\sigma})\,a^{\dagger}_{n,j,m_j,\sigma}a_{n,j,m_j,\sigma} +$$
$$+\sum_{n\neq n',j,m_j,\sigma}V_{n,n';j,\sigma}a^{\dagger}_{n,j,m_j,\sigma}a_{n',j,m_j,\sigma}.$$

Як і будь-яка квадратична форма, цей гамільтоніан можна точно діагоналізувати. Але основний внесок у зсув енергії відбувається через діагональні елементи $V^{(1)}(\mathbf{r})$ і $V^{(2)}(\mathbf{r})$, які розраховуватимуться нижче.

З урахуванням явних виразів для радіальних функцій (див. [17]), діагональні елементи $V^{(i)}_{n,j,\sigma}$ $(i = 1, 2)$ дорівнюють

$$V^{(i)}_{n,j,\sigma} = A^2_{n,j}\int\limits_0^{\infty} V^{(i)}_{\mathrm{RC}}\,(\rho)\,e^{-\rho}\rho^{2\gamma_j}K^{(i)}_{n_r,j,\sigma}(\rho)\,d\rho,$$

де $K^{(i)}_{n_r,j,\sigma}$ – поліноми порядку $2n_r$, що становлять

$$K^{(1)}_{n_r,j,\sigma}(\rho) = \left(P^{(\sigma)}_{n_r,j}(\rho)\right)^2 + \lambda^2_{n,j}\left(W^{(-\sigma)}_{n_r,j}(\rho)\right)^2 =$$
$$= \sum_{\nu=0}^{2n_r} a^{(1)}_{\nu}(n,j,\sigma)\rho^{\nu}, \tag{32}$$
$$K^{(2)}_{n_r,j,\sigma}(\rho) = P^{(\sigma)}_{n_r,j}(\rho)W^{(-\sigma)}_{n_r,j}(\rho) =$$
$$= \sum_{\nu=0}^{2n_r} a^{(2)}_{\nu}(n,j,\sigma)\rho^{\nu}. \tag{33}$$

Тут коефіцієнти $a^{(i)}_{\nu}(n,j,\sigma)$ залежать від явних виразів радіальних функцій для даного стану. Отже, діагональні елементи дорівнюють

$$V^{(i)}_{n,j,\sigma} = A^2_{n,j}\sum_{\nu=0}^{2n_r} a^{(i)}_{\nu}(n,j,\sigma)\int\limits_0^{\infty} V^{(i)}_{RC}\,(\rho)\,e^{-\rho}\rho^{2\gamma_j+\nu}d\rho. \tag{34}$$

4.1. Модифікація кулонівського поля поляризацією фотона

У цьому випадку, з урахуванням рівняння (2), збурення PP можна записати у вигляді

$$-e\delta\varphi_{\mathrm{PP}}(\rho) = -\frac{4mc^2\alpha^3}{3\pi\mathcal{N}_{n,j}}\frac{1}{\rho}F(\rho), \tag{35}$$

де

$$F(\rho)=\int\limits_1^\infty e^{-(\mathcal{N}_{n,j}/\alpha)\rho\zeta}\left(1+\frac{1}{2\zeta^2}\right)\frac{\sqrt{\zeta^2-1}}{\zeta^2}d\zeta,\qquad(36)$$

$$\rho=\frac{2r}{r_B\mathcal{N}_{n_r,j}}$$

– безрозмірна радіальна змінна, характерна для кожного енергетичного стану, і $r_B=\hbar^2/me^2$ – борівський радіус.

Елементи діагональної матриці (34) $V^{(1)}_{n,j,\sigma}=V_{\rm PP}\,(n,j,\sigma)$ після інтегрування по ρ мають такий вигляд:

$$V_{\rm PP}\,(n,j,\sigma)=-\frac{mc^2\alpha^3}{3\pi}\frac{(1+\varepsilon_{n,j})\,(\mathcal{N}_{n,j}+\kappa_j)\,n_r!}{\mathcal{N}^2_{n,j}\Gamma\,(n_r+1+2\gamma_j)}\times$$
$$\times\sum_{\nu=0}^{2n_r}a^{(1)}_\nu(n,j,\sigma)\Gamma\,(2\gamma_j+\nu)\left(\frac{\alpha}{\mathcal{N}_{n,j}}\right)^{2\gamma_j+\nu}C^{\rm (PP)}_{2\gamma_j+\nu},\qquad(37)$$

де

$$C^{\rm (PP)}_\mu=\int\limits_1^\infty\left(1+\frac{1}{2\zeta^2}\right)\frac{\sqrt{\zeta^2-1}}{\zeta^2\,(\zeta+\alpha/\mathcal{N}_{n,j})^\mu}d\zeta.\qquad(38)$$

Через малість параметра $\alpha\ll1$, можна апроксимувати γ_j цілим числом, $\gamma_j\simeq\kappa_j$. Також, з огляду на нерівність $\zeta\gg\alpha/\mathcal{N}_{n,j}$ $(\zeta\geq1)$, розклад в ряд

$$\left(\zeta+\frac{\alpha}{\mathcal{N}_{n,j}}\right)^{-\mu}\approx$$
$$\approx\zeta^{-\mu}\left[1-\mu\frac{\alpha}{\mathcal{N}_{n,j}}+\frac{\mu(\mu+1)}{2!}\left(\frac{\alpha}{\mathcal{N}_{n,j}}\right)^2\frac{1}{\zeta^2}-...\right]$$

можна застосувати під інтегралом у рівнянні (38).

Нижче наведено явні вирази для елементів діагональної матриці потенціалу Улінга для найнижчих енергетичних станів.

i) Для основного стану $1S_{1/2}$ з квантовими числами $n=1$, $j=1/2$, $\sigma=+$ $(n_r=0,\ \kappa_{1/2}=1)$, ми маємо такі значення:

$$\mathcal{N}_{1,1/2}=1,\ \mu=2\gamma_1\simeq2,\ a^{(1)}_0(1,1/2,+)=\frac{2}{1+\varepsilon_{1,1/2}},$$

які дають $C^{\rm (PP)}_2\cong2/5$ і

$$V_{\rm PP}\,\left(1S_{1/2}\right)\approx-\frac{4mc^2\alpha^{3+2\gamma_1}}{15\pi\gamma_1}\simeq-\frac{4mc^2\alpha^5}{15\pi}.$$

ii) Збуджений стан $2P_{3/2}$ з квантовими числами $n=2$, $j=3/2$, $\sigma=+$ $(n_r=0,\ \kappa_{3/2}=2)$ характеризується числами

$$\mathcal{N}_{2,3/2}=2,\ \mu=2\gamma_2\simeq4,\ a^{(1)}_0(2,3/2,+)=\frac{2}{1+\varepsilon_{2,3/2}},$$

що в тому самому наближенні дає $C^{\rm (PP)}_4\simeq6/35$ і

$$V_{\rm PP}\,\left(2P_{3/2}\right)\approx-\frac{mc^2\alpha^7}{560\pi}.$$

iii) Для стану $2S_{1/2}$ з квантовими числами $n=2$, $j=1/2$, $\sigma=+$ $(n_r=1,\ \kappa_{1/2}=1)$ і для поліному радіальної функції (32)

$$K^{(1)}_{1,1/2,+}=\frac{2}{1+\varepsilon_{2,1/2}}\Big[\left(\mathcal{N}_{2,1/2}-1\right)^2\left(\mathcal{N}_{2,1/2}+2\right)-$$
$$-\left(\mathcal{N}_{2,1/2}-1\right)\left(\mathcal{N}_{2,1/2}+2\right)\rho+\rho^2\Big],\qquad(39)$$

матричний елемент у рівнянні (37) у наближенні $\mathcal{N}_{2,1/2}\simeq2$ і $\gamma_1\simeq1$ дорівнює

$$V_{\rm PP}\,\left(2S_{1/2}\right)\simeq-\frac{mc^2\alpha^5}{6\pi}\left(\frac{1}{5}-\frac{15\pi}{128}\alpha\right).$$

iv) Для стану $2P_{1/2}$ з квантовими числами $n=2$, $j=1/2$, $\sigma=-$ $(n_r=1,\ \kappa_{1/2}=1)$, поліном радіальної функції (32) дорівнює

$$K^1_{1,1/2,-}(\rho)=\frac{2\,(1+2\gamma_1)}{1+\varepsilon_{2,1/2}}\Bigg[\left(2-\mathcal{N}_{2,1/2}\right)+$$
$$+\frac{2-\mathcal{N}_{2,1/2}}{\mathcal{N}_{2,1/2}+1}\rho+\frac{\rho^2}{\left(\mathcal{N}_{2,1/2}+1\right)^2}\Bigg].$$

Тут $\mathcal{N}_{2,1/2}\approx2$ і $2-\mathcal{N}_{2,1/2}\simeq\alpha^2/4$. Тому поліном можна апроксимувати виразом

$$K^1_{1,1/2,-}(\rho)\simeq\frac{2\,(1+2\gamma_1)}{1+\varepsilon_{2,1/2}}\left[\frac{\alpha^2}{4}+\frac{\alpha^2}{12}\rho+\frac{1}{9}\rho^2\right],\qquad(40)$$

і для матричного елемента (37) отримуємо вираз

$$V_{\rm PP}\,(2,1/2,-)=-\frac{mc^2\alpha^7}{32\pi}\left(\frac{9}{35}+\frac{5\pi}{128}\alpha\right).$$

4.2. Модифікація кулонівського поля електричним формфактором електрона

Вираз для електричного формфактора $F_1(q^2)$ у рівнянні (4) містить в аргументі логарифма параметр $\lambda\to0$, який є “кінцевою віртуальною масою фотона”, введеною для усунення інфрачервоної сингулярності. Він відіграє роль параметра обрізання на низьких частотах. У стандартному розрахунку значення цього параметра у загальному випадку довільного Z приймається в інтервалі

$(Z\alpha)^2 m \ll \lambda \ll m$, і після додавання параметр низькочастотного внеску λ компенсується. Мінімізація низькочастотного внеску призводить до рівності $\ln\left(4m^2/\lambda^2\right) = 4\ln(1/\alpha) + \text{const}$, де значення const близьке до 1 [8, 9, 13], якщо $Z\alpha \ll 1$.

Ефективні потенціали SE (5) і (6) вперше були розглянуті в [13] і використані як в розрахунках релятивістських важких елементів, так і в молекулярних розрахунках (див. [14, 18]). Як і вище, тут ми розглядаємо спектр водню ($Z = 1$). Отже,

$$\ln\frac{2m}{\lambda} = 2\ln\frac{1}{\alpha}. \tag{41}$$

Відповідно до рівняння (5), збурення $V_{\text{elec}}(\rho) = -e\delta\varphi_E(\rho)$ набуває вигляду

$$V_{\text{elec}}(\rho) = \frac{mc^2\alpha^3}{\pi\mathcal{N}_{n,j}}\frac{1}{\rho}F_2(\rho), \tag{42}$$

де

$$F_2(\rho) = \int\limits_1^\infty d\zeta f_{\text{elec}}(\zeta)\, e^{-\frac{\mathcal{N}_{n,j}}{\alpha}\zeta\rho},$$

$$f_{\text{elec}}(\zeta) = \frac{2 - 3\zeta^2 + \left(2\zeta^2 - 1\right)\ln\left[\left(\frac{4m}{\lambda}\right)^2\left(\zeta^2 - 1\right)\right]}{\zeta^2\sqrt{\zeta^2 - 1}}.$$

Таким чином, діагональні матричні елементи, визначені в рівнянні (42), дорівнюють

$$V_{\text{elec}}(n, j, \sigma) = -\frac{mc^2\alpha^3}{4\pi}\frac{(1 + \varepsilon_{n,j})(\mathcal{N}_{n,j} + \kappa_j)\, n_r!}{\mathcal{N}_{n,j}^2\Gamma\left(n_r + 1 + 2\gamma_j\right)} \times$$
$$\times\sum_{\nu=0}^{2n_r} a_\nu^{(1)}(n, j, \sigma)\Gamma\left(2\gamma_j + \nu\right)\left(\frac{\alpha}{\mathcal{N}_{n,j}}\right)^{2\gamma_j+\nu} C_{2\gamma_j+\nu}^{(\text{elec})}, \tag{43}$$

де

$$C_\mu^{(\text{elec})} = \int\limits_1^\infty \frac{f_{\text{elec}}(\zeta)}{\left(\zeta + \frac{\alpha}{\mathcal{N}_{n,j}}\right)^\mu}d\zeta.$$

Знову в цих інтегралах ми можемо використати розклад виразу $(\zeta + \alpha/\mathcal{N}_{n,j})^{-\mu}$ в ряд та обчислити інтеграли, використовуючи ту саму зміну змінної, що й у випадку формфактора електрона [8].

Для станів із максимально можливим значенням $j = j_n = n - 1/2$, при заданому n, коли $K_n^{(+)} = 2/(1 + \varepsilon_n)$, маємо

$$V_{\text{elec}}(n, +) = \frac{mc^2\alpha^{2\gamma_n+3}}{2\pi n^{2\gamma_n+1}\gamma_n}C_{2\gamma_n}^{(\text{elec})}, \quad \gamma_n \simeq n.$$

Нижче ми записуємо явні вирази для діагональних матричних елементів для найнижчих енергетичних станів у наближенні $\mathcal{N}_{2,1/2} \simeq 2$ і $\gamma_1 \simeq 1$.

i) Для основного стану $1S_{1/2}$ з урахуванням рівняння (41), ми маємо

$$C_2^{(\text{elec})} \simeq \frac{8}{3}\left(2\ln\frac{1}{\alpha} - \frac{3}{8}\right).$$

Тому

$$V_{\text{elec}}(1S_{1/2}) = \frac{4mc^2\alpha^5}{3\pi}\left(2\ln\frac{1}{\alpha} - \frac{3}{8}\right).$$

ii) Для першого збудженого стану $2P_{3/2}$ (тобто $n = 2$, $j = 3/2$, $\sigma = +$), маємо

$$C_4^{(\text{elec})} = \frac{8}{5}\left(2\ln\frac{1}{\alpha} - \frac{11}{12}\right).$$

Отже,

$$V_{\text{elec}}(2P_{3/2}) = \frac{mc^2\alpha^7}{80\pi}\left(2\ln\frac{1}{\alpha} - \frac{11}{12}\right).$$

iii) Для стану $2S_{1/2}$ ($n = 2$, $j = 1/2$, $\sigma = +$, і $n_r = 1$) з поліномом радіальної функції (39) і приймаючи

$$C_3^{(\text{elec})} \approx \frac{\pi}{8}\left(10\ln\frac{1}{\alpha} - 7\right),$$

отримуємо, що діагональний матричний елемент дорівнює

$$V_{\text{elec}}(2S_{1/2}) = \frac{mc^2\alpha^5}{6\pi}\left[2\ln\frac{1}{\alpha} - \frac{3}{8} - \frac{3\pi}{64}\left(10\ln\frac{1}{\alpha} - 7\right)\alpha\right].$$

iv) Для стану $2P_{1/2}$ ($n = 2$, $j = 1/2$, $\sigma = -$ і $n_r = 1$) з $K_{1,1/2,-}^{(1)}(\rho)$, що описується формулою (40), отримуємо такий вираз діагонального матричного елемента для електричного формфактора:

$$V_{\text{elec}}(2P_{1/2}) \simeq \frac{mc^2\alpha^7}{2^4\pi}\left(\frac{7}{5}\ln\frac{1}{\alpha} - \frac{89}{240} + \frac{\alpha}{6}C_3^{(\text{elec})}\right).$$

4.3. Модифікація кулонівського поля поляризацією вакууму за рахунок поля заряду ядра

Це збурення описується членом $V_{\text{vac}}(r) = -e\delta\varphi_{\text{vac}}(r)$, який, враховуючи вираз (14), має вигляд

$$V_{\text{vac}}(\rho) = \frac{2mc^2\alpha^2}{3\mathcal{N}_{n,j}}\tilde{\Phi}(\rho).$$

Тут, згідно з (15),

$$\tilde{\Phi}(\rho) = \frac{1}{\rho} - \frac{\pi}{2\sqrt{2}\beta_{n,j}} -$$
$$- \frac{1}{4\sqrt{2}\beta_{n,j}} \frac{1}{2} \ln \frac{\rho^2 + \sqrt{2}\beta_{n,j}\rho + \beta_{n,j}^2}{\rho^2 - \sqrt{2}\beta_{n,j}\rho + \beta_{n,j}^2} + \frac{1}{2\sqrt{2}\beta_{n,j}} \times$$
$$\times \left[\arctan\left(\frac{\sqrt{2}\rho}{\beta_{n,j}} - 1\right) + \arctan\left(\frac{\sqrt{2}\rho}{\beta_{n,j}} + 1\right)\right], \qquad (44)$$

де введене таке позначення:

$$\beta_{n,j} = \frac{2\alpha}{\mathcal{N}_{n,j}} \left(\frac{2\alpha^3}{15\pi}\right)^{1/4}.$$

Діагональні матричні елементи цього збурення описуються виразом

$$V_{\text{vac}}(n, j, \sigma) = \frac{2mc^2\alpha^2}{3\mathcal{N}_{n,j}} A_{n,j}^2 \mathcal{I}_{n,j}^{(\sigma)}, \qquad (45)$$

де

$$\mathcal{I}_{n,j}^{(\sigma)} = \int_0^\infty \tilde{\Phi}(\rho) e^{-\rho} \rho^{2\gamma_j} K_{n_r,j,\sigma}^{(1)}(\rho)\, d\rho,$$

$\tilde{\Phi}$ визначено в рівнянні (44), і $K_{n_r,j,\sigma}^{(1)}$ є поліномом (32). Підставляючи явні вирази цих поліномів у матричний елемент, останній набуває вигляду

$$\mathcal{I}_{n,j}^{(\sigma)} = \sum_{\nu=0}^{2n_r} a_\nu^{(1)}(n, j, \sigma) \int_0^\infty \tilde{\Phi}(\rho) e^{-\rho} \rho^{2\gamma_j + \nu} d\rho.$$

Тому задача зводиться до обчислення інтегралів

$$\mathcal{J}_{2\kappa_j+\nu} = \int_0^\infty \tilde{\Phi}(\rho) e^{-\rho} \rho^{2\gamma_j + \nu} d\rho, \qquad (46)$$

де $\tilde{\Phi}$ визначено формулою (44). Степінь $2\gamma_j + \nu = \mu$ змінної ρ можна апроксимувати цілими числами, $\mu = 2\kappa_j + \nu$, з огляду на малість константи $\alpha \ll 1$ ($\gamma_j \simeq \kappa_j$). Але навіть у цьому випадку ми не маємо аналітичного виразу для таких інтегралів. Тому, щоб аналітично отримати залежність інтегралів $\mathcal{J}_{2\kappa_j+\nu}$ від малого параметра $\beta_{n,j}$, виразимо функції логарифма та арктангенса в рівнянні (44) через інтеграли:

$$\frac{1}{4\sqrt{2}\beta_{n,j}} \frac{1}{2} \ln \frac{\rho^2 + \sqrt{2}\beta_{n,j}\rho + \beta_{n,j}^2}{\rho^2 - \sqrt{2}\beta_{n,j}\rho + \beta_{n,j}^2} =$$
$$= \frac{1}{4} \int_{-1}^{1} dt \frac{\rho}{\rho^2 + \sqrt{2}\beta t \rho + \beta^2},$$

$$\frac{1}{\beta_{n,j}} \left[\arctan\left(\frac{\sqrt{2}\rho}{\beta_{n,j}} - 1\right) + \arctan\left(\frac{\sqrt{2}\rho}{\beta_{n,j}} + 1\right)\right] =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^1 dt \left[\frac{\rho - \beta/\sqrt{2}}{\beta^2/2 + \left(\rho - \beta/\sqrt{2}\right)^2 t^2} + \right.$$
$$\left. + \frac{\rho + \beta/\sqrt{2}}{\beta^2 + \left(\rho + \beta/\sqrt{2}\right)^2 t^2}\right].$$

Переходячи від змінної ρ до змінної $x = \rho \mp \beta/\sqrt{2}$, можна виконати інтегрування по радіальній змінній у рівнянні (46), що призводить до представлення матричних елементів поляризації вакууму (45) за допомогою таких інтегралів:

$$\int_0^\infty \frac{e^{-x} x^{2n+1}}{x^2 + a^2}\, dx = (-1)^{n-1} a^{2n} [\operatorname{ci}(a) \cos a +$$
$$+ \operatorname{si}(a) \sin a] + \sum_{k=1}^{n} (2n - 2k + 1)! \left(-a^2\right)^{k-1},$$

якщо $\mu = 2\kappa_j + \nu$ є непарне число, або

$$\int_0^\infty \frac{e^{-x} x^{2n}}{x^2 + a^2}\, dx = (-1)^n a^{2n-1} [\operatorname{ci}(a) \sin a -$$
$$- \operatorname{si}(a) \cos a] + \sum_{k=1}^{n} (2n - 2k)! \left(-a^2\right)^{k-1}$$

при парному μ. Тут $\operatorname{si}(a)$ і $\operatorname{ci}(a)$ є інтегральними функціями синуса та косинуса, відповідно, а $a \sim \beta_{n,j}$. Оскільки $\beta_{n,j} \ll 1$, можна використовувати для $\operatorname{ci}(a)$ і $\operatorname{si}(a)$ такі розклади:

$$\operatorname{si}(\xi) = -\frac{\pi}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \xi^{2k-1}}{(2k-1)\,(2k-1)!},$$

$$\operatorname{ci}(\xi) = \mathbb{C} - \ln \xi + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{\xi^{2k}}{2k(2k)!},$$

де $\mathbb{C} = 0{,}5772\ldots$ – стала Ейлера.

Нижче, оминаючи громіздкі деталі розрахунку з використанням табличних інтегралів [19], запишемо явні вирази для діагональних матричних елементів для найнижчих енергетичних станів.

i) Для основного стану $1S_{1/2}$ з квантовими числами $n = 1$, $j = 1/2$, $\sigma = +$ ($n_r = 0$, $\kappa_{1/2} = 1$, $\gamma_{1/2} \simeq 1$), і
$\mathcal{N}_{1,1/2} = 1$, $a_0^1 = \dfrac{2}{1+\varepsilon_1}$, $\beta_{1,1/2} \equiv \beta_1 = 2\alpha \left(\dfrac{2\alpha^3}{15\pi}\right)^{1/4}$,

елементом діагональної матриці буде

$$V_{\text{vac}}(1, 1/2, +) = \frac{mc^2\alpha^2}{3}\left(\frac{2}{3}\mathbb{C} + \frac{2}{3}\ln\frac{\sqrt{2}}{\beta_1} + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{3}\sqrt{2}\ln\frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1} + \frac{5}{12}\ln 2 + \frac{\pi}{12} - \frac{1}{3}\right)\frac{\beta_1^2}{2}.$$

ii) Для збудженого стану $2P_{3/2}$ з $n = 2$, $j = 3/2$, $\sigma = +$ (тут $n_r = 0$, $\kappa_{3/2} = 2$, $\gamma_{3/2} \simeq 2$), а також
$\mathcal{N}_{2,3/2} = 2, \quad a_0^{(1)}(2, 1/2) = \dfrac{2}{1+\varepsilon_2}$,
$\beta_{2,3/2} \equiv \beta_2 = \alpha\left(\dfrac{2\alpha^3}{15\pi}\right)^{1/4}$,

у цьому ж наближенні діагональний матричний елемент становить
$$V_{\text{vac}}(2, 3/2, +) = -\frac{5mc^2\alpha^2}{216}\left(2 - \sqrt{2}\right)\frac{\beta_2^2}{2}.$$

iii) Для збудженого стану $2S_{1/2}$ з $n = 2$, $j = 1/2$, $\sigma = +$ ($n_r = 1$, $\kappa_j = 1$), та в наближеннях $\gamma_{1/2} \simeq 1$,
$\mathcal{N}_{2,1/2} \approx 2, \quad K^+_{1,1/2}(\rho) \simeq \dfrac{2}{1+\varepsilon_{2,1/2}}\left(4 - 4\rho + \rho^2\right)$,
$\beta_{2,1/2} \approx \beta_2$,

елемент діагональної матриці дорівнює

$$V_{\text{vac}}(2, 1/2, +) = \frac{mc^2\alpha^2}{24}\left(\frac{8}{3}\mathbb{C} + \frac{8}{3}\ln\frac{\sqrt{2}}{\beta_2} + \right.$$
$$\left. + \frac{4}{3}\sqrt{2}\ln\frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1} + \frac{5}{3}\ln 2 + \frac{\pi}{3} + \frac{4}{3} + \frac{5\sqrt{2}}{3}\right)\frac{\beta_2^2}{2}.$$

iv) Для збудженого стану $2P_{1/2}$ з $n = 2$, $j = 1/2$, $\sigma = -$ ($n_r = 1$, $\kappa_j = 1$) у тих самих наближеннях $\mathcal{N}_{2,1/2} \approx 2$, $\beta_{2,1/2} \approx \beta_2$, та з урахуванням наближень
$2 - \mathcal{N}_{2,1/2} \simeq \dfrac{\alpha^2}{4}$,
$$K^-_{1,1/2}(\rho) \simeq \frac{2\left(1+2\gamma_1\right)}{1+\varepsilon_{2,1/2}}\left(\frac{Z^2\alpha^2}{4} + \frac{Z^2\alpha^2}{12}\rho + \frac{1}{9}\rho^2\right),$$

елемент діагональної матриці для стану $2P_{1/2}$ становить
$$V_{\text{vac}}(2, 1/2, -) = -\frac{mc^2\alpha^5}{48\pi}\left(1 + \frac{3}{8}\alpha^2\right).$$

4.4. Модифікація кулонівського поля магнітним формфактором електрона

Діагональні матричні елементи збурення

$$V_{\text{mag}}(\mathbf{r}) = -e\delta\varphi_{\text{mag}}(r)$$

завдяки магнітному формфактору (6) визначаються інтегралом з поліномом (33),

$$V_{\text{mag}}(n, j, m_j, \sigma) =$$
$$= \lambda_{n,j}A^2_{n,j}\int\limits_0^\infty V^{(2)}_{\text{mag}}(\rho)\, e^{-\rho}\rho^{2\gamma_j}K^{(2)}_{n_r,j,\sigma}(\rho)\, d\rho d\rho.$$

Згідно з рівняннями (6), (7) та визначення (36),

$$V^{(2)}_{\text{mag}}(\rho) = \frac{mc^2\alpha^4}{\pi\mathcal{N}^2_{n,j}}\frac{d\tilde{\phi}}{d\rho},$$

де
$$\tilde{\phi}(\rho) = \frac{1}{\rho}\left(1 - \int\limits_1^\infty e^{-\frac{\mathcal{N}_{n,j}}{\alpha}\zeta\rho}\frac{d\zeta}{\zeta^2\sqrt{\zeta^2-1}}\right). \tag{47}$$

Тому,
$$V_{\text{mag}}(n, j, \sigma) = -\frac{2mc^2\alpha^5}{\pi\mathcal{N}^3_{n,j}}\frac{\left(\mathcal{N}_{n,j} + \kappa_j\right)n_r!}{4\mathcal{N}_{n,j}\Gamma\left(n_r + 1 + 2\gamma_j\right)} \times$$
$$\times\sum_{\nu=0}^{2n_r} a^{(2)}_\nu(n, j, \sigma)\int\limits_0^\infty\frac{d\tilde{\phi}}{d\rho}e^{-\rho}\rho^{2\gamma_j+\nu}d\rho.$$

Тут інтеграл можна обчислити за допомогою співвідношення

$$\int\limits_0^\infty\frac{d\tilde{\phi}(\rho)}{d\rho}\, e^{-\rho}\rho^{2\gamma_j+\nu}d\rho =$$
$$= -\int\limits_0^\infty\tilde{\phi}(\rho)\,\frac{d}{d\rho}\, e^{-\rho}\rho^{2\gamma_j+\nu}d\rho,$$

яке з урахуванням явного виразу для $\tilde{\phi}(\rho)$ дозволяє інтегрувати результат по ρ. Таким чином, ми отримуємо такий вираз для діагональних елементів матриці:
$$V_{\text{mag}}(n, j, m_j, \sigma) = \frac{2mc^2\alpha^5}{\pi\mathcal{N}^3_{n,j}}\frac{\left(\mathcal{N}_{n,j} + \kappa_j\right)n_r!}{4\mathcal{N}_{n,j}\,\Gamma\left(n_r + 1 + 2\gamma_j\right)} \times$$
$$\times\sum_{\nu=0}^{2n_r} a^{(2)}_\nu(n, j, \sigma)\,\Gamma\left(2\gamma_j + \nu - 1\right) \times$$

$$\times\left[1-(2\gamma_j+\nu)\,C^{(\mathrm{mag})}_{2\gamma_j+\nu-1}\left(\frac{\alpha}{\mathcal{N}_{n,j}}\right)^{2\gamma_j+\nu-1}+\right.$$

$$\left.+(2\gamma_j+\nu-1)\,C^{(\mathrm{mag})}_{2\gamma_j+\nu}\left(\frac{\alpha}{\mathcal{N}_{n,j}}\right)^{2\gamma_j+\nu}\right],$$

де

$$C^{(\mathrm{mag})}_{\mu}=\int\limits_1^{\infty}\frac{d\zeta}{\left(\zeta+\dfrac{\alpha}{\mathcal{N}_{n,j}}\right)^{\mu}\zeta^2\sqrt{\zeta^2-1}}\approx$$

$$\approx\int\limits_1^{\infty}\frac{d\zeta}{\zeta^{2+\mu}\sqrt{\zeta^2-1}}.$$

Для станів із максимально можливим значенням j при заданому n, коли $n_r=0$, $\mathcal{N}_{n,j}=n$. і $P^{(+)}_{0,j}W^{(-)}_{0,j}=1$, матричний елемент $V_{\mathrm{mag}}(n,+)$ в наближенні $\gamma_n\simeq n$ дорівнює

$$V_{\mathrm{mag}}(n,j_n,+)=\frac{mc^2\alpha^5}{2\pi n^4\,(2n-1)}\times$$

$$\times\left[1-(2n)\,C^{(\mathrm{mag})}_{2n-1}\left(\frac{\alpha}{n}\right)^{2n-1}+\right.$$

$$\left.+(2n-1)\,C^{(\mathrm{mag})}_{2n}\left(\frac{\alpha}{n}\right)^{2n}\right].$$

Як і раніше, нижче ми обчислимо матричні елементи для найнижчих енергетичних станів у наближенні $\gamma_1\simeq 1$.

i) Для основного стану $1S_{1/2}$ з квантовими числами $n=1$, $j=1/2$, $\sigma=+$ ($n_r=0$, $\kappa_{1/2}=1$, $\gamma_{1/2}\simeq 1$), і

$$\mathcal{N}_{1,1/2}=1,\quad a_0^{(2)}=1,$$

діагональний матричний елемент становить

$$V_{\mathrm{mag}}(1,1/2,+)=\frac{mc^2\alpha^5}{2\pi}\left(1-\frac{\pi}{2}\alpha+\frac{2}{3}\alpha^2\right).$$

ii) Для збудженого стану $2P_{3/2}$ з $n=2$, $j==3/2$, $\sigma=+$ ($n_r=0$, $\kappa_{3/2}=2$, $\gamma_{3/2}\simeq 2$), і

$$\mathcal{N}_{2,3/2}=2,\quad a_0^{(1)}(2,1/2)=1,$$

у цьому ж наближенні діагональний матричний елемент дорівнює

$$V_{\mathrm{mag}}(2,3/2,+)=\frac{mc^2\alpha^5}{96\pi}\left(1-\frac{3\pi}{32}\alpha^3+\frac{3}{16}C_4\alpha^4\right).$$

iii) Для збудженого стану $2S_{1/2}$ з $n=2$, $j==1/2$, $\sigma=+$ ($n_r=1$, $\kappa_j=1$), а також

$$K^{(2)}_{1,1/2,+}(\rho)\approx 8-6\rho+\rho^2,\quad a_0^{(2)}(2,1/2,+)=8,$$

$$a_1^{(2)}(2,1/2,+)=-6,\quad a_2^{(2)}(2,1/2,+)=1,$$

у наближенні $\mathcal{N}_{2,1/2}\simeq 2$, і нехтуючи вищими порядками α, отримуємо матричний елемент для стану $2S_{1/2}$:

$$V_{\mathrm{mag}}(2,1/2,+)\simeq\frac{mc^2\alpha^5}{6\pi}\frac{3}{8}\left(1-\frac{\pi}{2}\alpha\right).$$

iv) Для збудженого стану $2P_{1/2}$ з $n=2$, $j==1/2$, $\sigma=-$ ($n_r=1$, $\kappa_j=1$), у тому самому наближенні $\mathcal{N}_{2,1/2}\approx 2$, $2-\mathcal{N}_{2,1/2}\simeq\alpha^2/4$, та з урахуванням

$$K^{-}_{(2)}(\rho)=\left(\mathcal{N}^2_{2,1/2}-1\right)\mathcal{N}_{2,1/2}\left(\mathcal{N}_{2,1/2}-2\right)-$$

$$-2\left(\mathcal{N}_{2,1/2}-1\right)^2\rho+\frac{\mathcal{N}_{2,1/2}-1}{\mathcal{N}_{2,1/2}+1}\rho^2\simeq$$

$$\simeq-\frac{3}{2}\alpha^2-2\rho+\frac{1}{3}\rho^2,$$

елемент діагональної матриці для стану $2P_{1/2}$ дорівнює

$$V_{\mathrm{mag}}(2,1/2,-)=-\frac{mc^2\alpha^5}{48\pi}\left(1+\frac{3}{8}\alpha^2\right).$$

5. Лембівський зсув рівнів водню $2S_{1/2}$ та $2P_{1/2}$

У КЕД, РД нульового порядку з кулонівським потенціалом,

$$\left(c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}+mc^2\hat{\beta}-\frac{e^2}{r}\right)\Psi=E\Psi,$$

дає лише приблизний опис водневоподібних зв'язаних станів. Це рівняння дає енергетичний спектр із рівнями зв'язаного стану (24), які залежать лише від головного квантового числа n і повного кутового моменту j, та є виродженими відносно числа σ. Це виродження є випадковим у тому сенсі, що воно відбувається, лише якщо взаємодія між електроном і протоном точно пропорційна $\sim 1/r$, як це передбачено законом Кулона. Таке виродження пояснюється наявністю в кулонівському полі додаткового інтеграла руху Джонсона–Ліпмана, який не комутує з інваріантом Дірака.

У 1947 році, в експерименті Лемба–Резерфорда [20], була визначена різниця між рівнями енергії станів $2S_{1/2}$ і $2P_{1/2}$ атома водню. Розщеплення між цими рівнями, відоме як зсув Лемба, усуває виродження в спектрі РД в кулонівському полі. Саме існування зсуву Лемба вказує на те, що закон Кулона не виконується на малих відстанях поблизу атомного ядра. У цій статті ми розглянули основні фактори, які порушують кулонівську симетрію, а саме, модифікацію закону Кулона, передбачену в КЕД.

Перш за все, КЕД – це теорія взаємодіючих спінорних (діраківських) та електромагнітних (фотонних) полів, в яких електрично заряджені частинки взаємодіють шляхом обміну фотонами, а пропагатор фотонів описує цю взаємодію. Взаємодія фотона з електрон-позитронним спінорним полем вводить поляризаційний оператор, пов'язаний з віртуальним випромінюванням і поглинанням електрон-позитронних пар, у фотонний пропагатор. Цей ефект призводить до модифікації потенціалу Кулона до форми потенціалу Улінга (2).

По-друге, електрон безперервно випромінює та поглинає віртуальні фотони, і в результаті його електричний заряд поширюється на кінцевий об'єм, описаний формфакторами електрона в рівнянні (1). Це також призводить до ефективних модифікацій (2)–(3) взаємодії електрона із зовнішнім зарядом. Електричний формфактор змінює закон Кулона, а магнітний формфактор описує радіаційні поправки до спін-орбітального зв'язку.

По-третє, ми враховуємо також вакуумну поляризацію зовнішнього заряду електричним полем. При сильних зовнішніх електричних полях $\mathcal{E} \sim \pi m^2 c^3/(e\hbar)$ можливе народження реальних електрон-позитронних пар із вакууму (так званий ефект Швінгера). Легко оцінити, що для точкового заряду такі поля відповідають відстані $r^2 = (\alpha/\pi)\lambda_{\rm C}^2$ (тут $\alpha = e^2/(\hbar c)$ – постійна тонкої структури, а $\lambda_c = h/(mc)$ – комптонівська довжина хвилі). Перешкоджає таким процесам поляризація вакууму, яку вперше розглянули В. Гейзенберг і Г. Ейлер. Наскільки нам відомо, вплив поляризації вакууму електричним полем зовнішнього заряду на зсув Лемба раніше не розглядався.

У цій статті розв'язки (23)–(24) РД з кулонівським потенціалом було використано як вихідну точку для отримання зв'язаного енергетичного спектра атома водню, коли всі три вищезгадані ефекти призводять до зсуву Лемба. В результаті, енергетичний спектр атома водню описується гамільтоніаном

$$\mathrm{H} = \sum_{n,j,m_j,\sigma} \tilde{E}_{n,j,\sigma} a^\dagger_{n,j,m_j,\sigma} a_{n,j,m_j,\sigma},$$

де

$$\tilde{E}_{n,j,\sigma} = mc^2 \varepsilon_{n,j} + \Delta_{n,j,\sigma}.$$

Тут величина

$$\Delta_{n,j,\sigma} \equiv V_{\rm PP}\,(n,j,\sigma) + V_{\rm elec}\,(n,j,\sigma) + \\ + V_{\rm vac}(n,j,\sigma) + V_{\rm mag}(n,j,\sigma)$$

визначає лембівські зсуви рівнів. Хоча спочатку зсув Лемба визначався як розщеплення між станами $2S_{1/2}$ і $2P_{1/2}$, різницю в рівнях з $n \neq 2$ також називають зсувом Лемба. Зокрема, для $\Delta_L \equiv \Delta_{2S_{1/2}} - \Delta_{2P_{1/2}}$ маємо

$$\Delta_L \simeq \frac{mc^2\alpha^5}{6\pi}\Bigg[\ln\frac{2m}{\lambda} + \frac{1}{8} - \frac{1}{5} - \\ - \frac{3}{8}\left(\frac{5\pi}{8}\ln\frac{4m}{\lambda} - \frac{11\pi}{16}\right)\alpha + \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi\alpha}{30}}\Bigg(\frac{8}{3}\mathbb{C} + \frac{5}{3}\ln 2 + \\ + \frac{8}{3}\ln\frac{\sqrt{2}}{\beta_2} + \frac{4}{3}\sqrt{2}\ln\frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1} + \frac{\pi}{3} + \frac{22}{9} + \frac{10\sqrt{2}}{9}\Bigg)\Bigg].$$

Нагадаємо, що вираз для електричного формфактора $F_1(q^2)$ у рівнянні (4) містить в аргументі логарифма параметр $\lambda \to 0$, який є "скінченною віртуальною масою фотона", введеною для усунення інфрачервоної розбіжності. Він відіграє роль параметра обрізання на низьких частотах. У стандартних розрахунках цей параметр у загальному випадку довільного Z приймається зі значенням в інтервалі $(Z\alpha)^2\, m \ll \lambda \ll m$, і після додавання параметр низькочастотного внеску λ компенсується. Мінімізація низькочастотного внеску призводить до рівності $\ln(2m/\lambda) \to \ln\left(1/Z^2\alpha^2\right) + \text{const}$, де $\text{const} \sim 1$ [8, 9, 13], що дозволяє використовувати його як певний параметр підгонки.

Ефективні потенціали (5) і (6) були вперше розглянуті в роботі [13] і використані в розрахунках релятивістських важких елементів та в молекулярних розрахунках (див. [14, 18]). Як і вище, тут ми розглядаємо спектр водню ($Z = 1$) і, відповідно до аналізу Швінгера [21], вибираємо

$$\ln\frac{2m}{\lambda} \to \ln\frac{1}{\alpha^2} - 2{,}8118 \tag{48}$$

 ISSN 0372-400X. Укр. фіз. журн. 2024. Т. 69, № 8

замість рівняння (41). Джуліан Швінгер використовував такі числові значення:

$$\alpha = \frac{1}{137{,}06}, \quad \ln\frac{m}{|E_1|} = \ln\frac{2}{\alpha^2} \approx 10{,}5,$$
$$\frac{\alpha^3}{3\pi} = \frac{mc^2\alpha^5}{6\pi} = 135{,}644 \text{ MHz},$$

а для маси електрона він використав еквівалентну масу (множник $M_p/(M_p + m_e)$), що дає значення

$$\Delta_L = E_{2S_{1/2}} - E_{2P_{1/2}} = 1050{,}55 \text{ MHz}.$$

На даний час прийняті такі значення:

$$\alpha = \frac{1}{137{,}036}, \quad \Delta_L^{(\text{theor})} = 1057{,}864 \text{ MHz},$$
$$\Delta_L^{(\text{exp})} = 1057{,}845 \text{ MHz}.$$

Для нашої оцінки зсув Лемба Δ_L можна представити у вигляді

$$\Delta_L = \frac{mc^2\alpha^5}{6\pi}C_L,$$

де

$$C_L = \left[\ln\frac{2m}{\lambda} - \frac{3}{40} - \frac{3}{8}\left(\frac{5\pi}{8}\ln\frac{4m}{\lambda} - \frac{11\pi}{16}\right)\alpha + \right.$$
$$+ \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi\alpha}{30}}\left(\frac{8}{3}\mathbb{C} + \frac{8}{3}\ln\frac{\sqrt{2}}{\beta_2} + \frac{4}{3}\sqrt{2}\ln\frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1} + \right.$$
$$\left.\left. + \frac{5}{3}\ln 2 + \frac{\pi}{3} + \frac{22}{9} + \frac{10\sqrt{2}}{9}\right)\right].$$

Тут константа C_L може бути представлена як $C_L = \ln\frac{2m}{\lambda} + D$, де $D = 0{,}400759$. Оцінюючи тепер C_L, виходячи з $\Delta_L^{(\text{exp})}$, ми можемо обчислити значення $\ln(2m/\lambda)$ і оцінити різницю

$$\ln\frac{2m}{\lambda} - \ln\frac{1}{\alpha^2} \approx -2{,}44262,$$

що дуже близько до $\sim -2{,}8118$. Отже, ми маємо вагомий аргумент на користь правильності наших розрахунків.

6. Висновки

Беручи до уваги, що правильний опис атома водню може бути забезпечений лише з використанням РД, ми розрахували зв'язані електронні стани атома водню з урахуванням модифікації закону Кулона в околі атомного ядра, передбаченої КЕД. Відхилення електричного поля від закону Кулона є основним чинником, який усуває "випадкове" виродження водневоподібних рівнів енергії та призводить до зсуву Лемба. РД та зсув Лемба обговорюються у багатьох підручниках з квантової електродинаміки та квантової теорії поля (див., наприклад, [8–10]). Перші результати щодо зсуву Лемба можна знайти в класичній монографії Бете та Солпітера [4], а сучасний стан теорії наведено у вичерпному огляді [22].

У теоретико-польовому підході, розрахунки поправок до енергетичних рівнів базуються на коваріантній формі функціонала Лагранжа КЕД. Електродинамічні поправки шукаються у вигляді розкладу в степеневий ряд за малим параметром α [8–10]. У цій схемі, зсув Лемба традиційно отримується з використанням теорії збурень у формі розкладу у степеневий ряд до заданого ступеня α, а для обчислення фізичних величин завжди використовуються власні функції рівняння Шредінгера як нерелятивістського наближення РД.

Наша ідея заснована на РД і принципово відрізняється від цієї схеми. Ми отримали релятивістський гамільтоніан, поданий у рівнянні (29), для атома водню із зовнішніми полями, використовуючи розв'язок РД з потенціалом Кулона як вихідну точку. Як збурення в цьому гамільтоніані ми розглянули відхилення електричного поля, що діє на електрон, від закону Кулона та розрахували лембівський зсув у рамках традиційного в квантовій механіці гамільтонівського опису. Елементи матриці збурень $V_{\{\nu\},\{\nu'\}}$ визначаються точним розв'язком РД з потенціалом Кулона. Тому релятивістський гамільтоніан у формі (29) містить усі так звані *релятивістські або зв'язані поправки* [22]. Цей підхід здається більш послідовним у порівнянні з іншими розрахунками (наприклад, діаграмами).

Варто зазначити, що тут ми взяли до уваги лише RC, які змінюють закон Кулона поблизу ядра, що призводить до розщеплення Лемба між різними рівнями енергії в загальному випадку. У випадку найнижчих станів водню $2S_{1/2}$ і $2P_{1/2}$, зсув Лемба дорівнює, згідно з нашими розрахунками, 1340 МГц, нехтуючи членами $\sim\alpha^2$.

Новою особливістю нашого підходу є послідовний розрахунок внеску поляризації вакууму в рівні енергії, виконаний у підрозділі 4 4.3. Наскільки нам відомо, це перший такий розрахунок. Зазвичай у цьому контексті поляризація вакууму розглядається як фактор, який призводить до модифікації закону Кулона у формі потенціалу Улінга. Крім того, як було показано вище, поляризація вакууму зарядом протона автоматично (тобто без будь-яких додаткових припущень) супроводжується появою деякого просторового масштабу r_0 (див. рівняння (11)), який, згідно з рівняннями (12) та (13), характеризує якісно різну просторову поведінку закону Кулона при $r \ll r_0$ та $r \gg r_0$, і може розглядатися як довжина поляризації ядра у вакуумі. Його можна опосередковано пов'язати з радіусом протона, хоча він має інше значення.

Будучи найпростішим з усіх стабільних атомів, водень є унікальним у сенсі його корисності для порівняння теорії та експериментів стосовно структур енергетичних рівнів зв'язаного стану. У наш час точна оптична спектроскопія та теоретичні розрахунки [22] надзвичайно вдосконалилися й досягли точки, коли розмір протона є обмежуючим фактором при порівнянні експерименту з теорією. Хоча зсуви рівнів енергії, пов'язані зі скінченним розміром протона, невеликі, середньоквадратичний радіус заряду можна визначити на основі високоточної спектроскопії та КЕД розрахунків зв'язаних станів. У зсуві Лемба переважають чисто радіаційні ефекти, і щоб отримати значення радіуса протона r_p зі спектроскопічних даних, необхідно мінімізувати теоретичну невизначеність у радіаційних поправках КЕД. У [23, 24], r_p було визначено за допомогою спектроскопії мюонного водню (μp, тобто протона, навколо якого обертається мюон). Отриманий за допомогою вимірювання мюонного зсуву Лемба та на основі поточних КЕД розрахунків радіус протона відрізняється від визначеного в експериментах з електронно-протонного розсіювання та від значення CODATA [25], і автори дійшли висновку про те, що причиною розбіжності можуть слугувати неправильні або відсутні члени КЕД, або неочікувано великі внески від ще не врахованих членів вищого порядку.

На даний час, теоретичне значення для різниці енергії $2S_{1/2} - 2P_{1/2}$ (1057,833 МГц) дуже близьке до найкращого експериментального значення 1057,845 МГц, що є видатним доказом достовірності КЕД. Різниця може бути пов'язана з радіусом r_0, визначеним у формулі (11) через поляризацію вакууму зарядом ядра, яка була розглянута в цій статті і яка раніше не була врахована. Точний розв'язок РД з потенціалом Кулона, який використовується для розрахунку елементів матриці, дає врахування членів вищого порядку за α.

Тут ми не ставили за мету отримати вирази для зсуву Лемба з високим порядком точності відносно константи α, оскільки, як було зазначено вище, розглянуті тут RC є лише частиною електродинамічних ефектів, які сприяють зсуву Лемба. Тому кількісну оцінку лембівського зсуву неможливо зробити без урахування магнітного моменту протона (надтонка структура) та ефекту віддачі (поправки приведеної електрон-протонної маси). Врахування відповідних ефектів потребує окремого дослідження.

Робота виконана за підтримки Відділення фізики та астрономії НАН України (фундаментальна наукова програма 0122U000887) та Фонду Саймонса (США).

1. P.A.M. Dirac. The quantum theory of the electron. *Proc. Roy. Soc. A* **117**, 610 (1928).
2. P.A.M. Dirac. *The Principles of Quantum Mechanics* (Clarendon Press, 1958).
3. A.A. Eremko, L.S. Brizhik, V.M. Loktev. Spin relevant invariants and the general solution of the Dirac equation for the Coulomb field. *Ann. Phys.* **439**, 168786 (2022).
4. H.A. Bethe, E.E. Salpeter. *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms.* (Springer, 1957).
5. A. Eremko, L. Brizhik, V. Loktev. General solution of the Dirac equation for quasi-two-dimensional electrons. *Ann. Phys.* **369**, 85 (2016).
6. A.A. Eremko, L.S. Brizhik, V.M. Loktev. On the theory of the Schrödinger equation with the full set of relativistic corrections. *Low Temp. Phys.* **44**, 573 (2018).
7. Н.Н. Боголюбов, Д.В. Ширков, *Квантовые поля* (Наука, 1980).
8. В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. *Релятивистская квантовая теория. Часть I.* (Наука, 1968).
9. А.И. Ахиезер, В.Б. Берестецкий. *Квантовая электродинамика* (Наука, 1981).
10. В.П. Гусинін, Е.В. Горбар. *Вступ до квантової теорії калібрувальних полів* (Академперіодика, 2023) [ISBN: 978-966-360-487-9].
11. E.A. Uehling. Polarization effects in the positron theory. *Phys. Rev.* **48**, 55 (1935).
12. A.M. Frolov, D.M. Wardlaw. Analytical formula for the Uehling potential. *Eur. Phys. J. B* **85**, 348 (2012).
13. V.V. Flambaum, J.S.M. Ginges. Radiative potential and calculations of QED radiative corrections to energy levels and electromagnetic amplitudes in many-electron atoms. *Phys. Rev. A* **72**, 052115 (2005).

14. J.S.M. Ginges, J.C. Berengut. Atomic many-body effects and Lamb shifts in alkali metals. *Phys. Rev. A* **93**, 052509 (2016).
15. W. Heisenberg, H. Euler. Folgerungen aus der Diracschen Theorie des Positrons. *Z. Phys.* **98**, 714 (1936).
16. M.E. Peskin, D.V. Schroeder. Renormalization of the electric charge. In: *An Introduction to Quantum Field Theory* (CRC Press, 2018), p. 244.
17. A.A. Eremko, L.S. Brizhik, V.M. Loktev. Input of the Coulomb law modification to the Lamb shift of the hydrogen atom. *ArXiv:2406.03350.*
18. A. Sunaga, M. Salman, T. Saue. 4-component relativistic Hamiltonian with effective QED potentials for molecular calculations. *J. Chem. Phys.* **157**, 164101 (2022).
19. И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений* (Гос. изд. физ.-мат. лит., 1963).
20. W.E. Lamb, R.C. Retherford. Fine structure of the hydrogen atom by a microwave method. *Phys. Rev.* **72**, 241 (1947).
21. J. Schwinger. *Particles, Sources and Fields, Vol.2* (Addison-Wesley Publ. Comp., 1973).
22. M.I. Eides, H. Grotch, V.A. Shelyuto. Theory of light hydrogenlike atoms. *Phys. Rep.* **342**, 63 (2001).
23. R. Pohl, A. Antognini *et al.* The size of the proton. *Nature* **466**, 213 (2010).
24. A. Antognini, F. Nez *et al.* Proton structure from the measurement of 2S-2P transition frequencies of muonic hydrogen. *Science* **339**, 417 (2013).
25. P.J. Mohr, D.B. Newell, B.N. Taylor. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2014. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **45**, 043102 (2016).

Одержано 12.06.24.

Переклад на українську мову О. Войтенка

A.A. Eremko, L.S. Brizhik, V.M. Loktev

TO THE THEORY OF THE LAMB SHIFT
IN THE RELATIVISTIC HYDROGEN ATOM

Radiative corrections which remove the accidental degeneracy in the spectrum of the relativistic hydrogen atom and lead to the modification of the Coulomb law, are calculated within the novel approach, based on the exact solution of the Dirac equation with the Coulomb potential. The energy spectrum of the hydrogen atom is obtained with account for these corrections, and the Lamb shift is calculated for the lowest energy states.

Keywords: Dirac equation, relativistic hydrogen atom, spinor invariant, radiative correction, modification of the Coulomb law, Lamb shift.