第10卷 第2期 高能物理与核物理 Vol. 10, No. 2
1986年3月 PHYSICA ENERGIAE FORTIS ET PHYSICA NUCLEARIS Mar., 1986

正电子素负离子（P_s^-）基态能级的相对论修正

何明科 饶建锡 林大航
（北京钢铁学院）

摘 要

本文使用三参数 Hylleraas 波函数算得正电子素负离子（P_s^-）基态能级相对论修正值为 4.5×10^{-4} eV，变分参数由正交试验法确定.

一、引 言

正电子素负离子（$e^-e^+e^-$ 系统，即 P_s^-）是三体束缚系统，它们之间的相互作用是纯轻子的电磁相互作用. 因此，它是一个检验 QED 理论及量子力学多体理论的较理想的系统. 1946 年 J. A. Wheeler 首先计算了 P_s^- 的束缚能，从理论上预言了它的存在[1]. 其后文献 [2—4] 相继计算了 P_s^- 的基态能级，现在公认的理论值为 -7.129 eV[5]. 但诸文献中均未涉及数学处理复杂的相对论修正问题.

1981 年 A. P. Mills 从实验上发现了 P_s^-[6]，证实了早期的预言. 因此，现在对 P_s^- 系统作更深入的研究，无论对理论物理学家，还是对实验物理学家都是十分有兴趣的课题.

只考虑 Coulomb 相互作用，P_s^- 系统的 Schrödinger 方程是

$$\left\{\frac{1}{2}(\nabla_1^2+\nabla_2^2+\nabla_3^2)+E+\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}-\frac{1}{r_{12}}\right\}\psi=0 \tag{1}$$

下标 1、2 分别表示两电子，3 表示正电子.

基态能级的变分公式[1,2]为

$$E=-L^2/4NM \tag{2}$$

$$N=\int\psi^2d\tau,\quad L=\int\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}-\frac{1}{r_{12}}\right)\psi^2d\tau,\quad M=\int\frac{1}{2}\left[(\nabla_1\psi)^2+(\nabla_2\psi)^2+(\nabla_3\psi)^2\right]d\tau.$$

用三参数 Hylleraas 波函数[7]近似描述 P_s^- 系统基态:

$$\psi=e^{-\alpha(r_1+r_2)}[1+\beta r_{12}+\gamma(r_1-r_2)^2] \tag{3}$$

其中 α、β、γ 是变分参数. 引入循环坐标[8—10]

$$u=\alpha(r_2+r_{12}-r_1),\quad v=\alpha(r_1+r_{12}-r_2),\quad w=2\alpha(r_1+r_2-r_{12}) \tag{4}$$

则: $\psi=e^{\frac{1}{2}(u+v+w)}\cdot F(u,v,w)$

本文 1984 年 9 月 10 日收到.

$$F(u,\ v,\ w)=1+\frac{\beta}{2\alpha}(u+v)+\frac{\gamma}{4\alpha^2}(u-v)^2 \tag{5}$$

可求得

$$\begin{aligned}E=-\alpha^2\Big[&22+88\frac{\beta}{\alpha}+78\frac{\gamma}{\alpha^2}+109\frac{\beta^2}{\alpha^2}+232\frac{\beta\gamma}{\alpha^3}\\&+249\frac{\gamma^2}{\alpha^4}\Big]^2\Big/\Big\{\Big[32+140\frac{\beta}{\alpha}+96\frac{\gamma}{\alpha^2}\\&+192\frac{\beta^2}{\alpha^2}+308\frac{\beta\gamma}{\alpha^3}+288\frac{\gamma^2}{\alpha^4}\Big]\cdot\Big[64\alpha^2\\&+220\alpha\beta+192\gamma+272\beta^2+572\frac{\beta\gamma}{\alpha}+960\frac{\gamma^2}{\alpha^2}\Big]\Big\}\end{aligned} \tag{6}$$

上式最小值为 P_s^- 系统基态 Coulomb 作用能，此时变分参数取值可确定波函数 ψ.

二、相对论修正

对于 P_s^- 系统的基态能量，轨道-自旋相互作用的贡献为零．近似到 V^2/C^2 级相对论修正的 Hamilton 量可表为[11,12]

$$H'=H_1+H_2+H_3+H_4+H_5+H_6 \tag{7}$$

$$H_1=-\frac{\alpha_e^2}{8}[(\nabla_1^2)^2+(\nabla_2^2)^2+(\nabla_3^2)^2] \tag{8}$$

$$\begin{aligned}H_2=-\frac{\alpha_e^2}{2}\Big\{&\Big[\frac{\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{p}_2}{r_{12}}+\frac{\boldsymbol{r}_{12}\cdot(\boldsymbol{r}_{12}\cdot\boldsymbol{p}_1)\boldsymbol{p}_2}{r_{12}^3}\Big]-\Big[\frac{\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{p}_3}{r_2}\\&+\frac{\boldsymbol{r}_2\cdot(\boldsymbol{r}_2\cdot\boldsymbol{p}_2)\boldsymbol{p}_3}{r_2^3}\Big]-\Big[\frac{\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{p}_3}{r_1}+\frac{\boldsymbol{r}_1\cdot(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{p}_1)\boldsymbol{p}_3}{r_1^3}\Big]\Big\}\end{aligned} \tag{9}$$

$$H_3=\pi\alpha_e^2[\delta(\boldsymbol{r}_1)+\delta(\boldsymbol{r}_2)-\delta(\boldsymbol{r}_{12})] \tag{10}$$

$$H_4=\frac{8\pi}{3}\alpha_e^2[\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_3\delta(\boldsymbol{r}_1)+\boldsymbol{s}_2\cdot\boldsymbol{s}_3\delta(\boldsymbol{r}_2)-\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2\delta(\boldsymbol{r}_{12})] \tag{11}$$

$$\begin{aligned}H_5=-\alpha_e^2\ \Big\{&\frac{1}{r_1^3}\Big[\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_3-\frac{3(\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{s}_3\cdot\boldsymbol{r}_1)}{r_1^2}\Big]\\&+\frac{1}{r_2^3}\Big[\boldsymbol{s}_2\cdot\boldsymbol{s}_3-\frac{3(\boldsymbol{s}_2\cdot\boldsymbol{r}_2)(\boldsymbol{s}_3\cdot\boldsymbol{r}_2)}{r_2^2}\Big]\\&-\frac{1}{r_{12}^3}\Big[\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2-\frac{3(\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{r}_{12})(\boldsymbol{s}_2\cdot\boldsymbol{r}_{12})}{r_{12}^2}\Big]\Big\}\end{aligned} \tag{12}$$

$$H_6=\frac{\pi}{2}\alpha_e^2[(3+4\boldsymbol{s}_2\cdot\boldsymbol{s}_3)\delta(\boldsymbol{r}_2)+(3+4\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_3)\delta(\boldsymbol{r}_1)] \tag{13}$$

其中 $\alpha_e=\frac{1}{137}$.

H_1 是由于“质量随速度变化”而引起的修正；H_2 对应粒子间相互作用的“经典相对论修正”，来自粒子所产生的电磁场的推迟效应；H_3 是 Dirac 理论的特征项，它也出现在电磁场中单电子的 Hamilton 量中；H_4、H_5 表示粒子间自旋磁矩的相互作用，其中 H_5 即所

调张量力；H_6 是电子与正电子间虚湮灭的贡献.

对于正电子素负离子基态，三个相对运动的轨道角动量均为零，所以张量力不作贡献[12]，$\langle\varphi|H_5|\varphi\rangle=0$

1. P_i^4 修正

由 Schrödinger 方程可得

$$(\nabla_1^2\phi)^2+(\nabla_2^2\phi)^2+(\nabla_3^2\phi)^2=-2(\nabla_1^2\phi\cdot\nabla_2^2\phi+\nabla_1^2\phi\cdot\nabla_3^2\phi+\nabla_2^2\phi\cdot\nabla_3^2\phi)+4[E-V(r)]^2\phi^2 \tag{14}$$

其中，
$$V(r)=-\frac{1}{r_1}-\frac{1}{r_2}+\frac{1}{r_{12}} \tag{15}$$

于是由 (8) 式求出 H_1 产生的修正量 $E_1=\frac{\langle\phi|H_1|\phi\rangle}{N}$，若令 $N'=(32\alpha^6/\pi^2)N$，则

$$E_1=-\frac{\alpha_e^2}{2N'}Q$$

$$Q=\int_0^\infty e^{-u}du\int_0^\infty e^{-v}dv\int_0^\infty e^{-w}dw\left[-\frac{8\alpha^4G\cdot H}{(u+v)}-\frac{2\alpha^4G\cdot K}{(2v+w)}-\frac{2\alpha^4H\cdot K}{(2u+w)}+BF^2\right] \tag{16}$$

G、H、K 皆为 $u^av^bw^c$ 的多项式(a、b、c 为整数)再由文献[10]提供的公式，E_1 可求.

2. 延迟修正

注意到两电子在 P_s^- 系统基态中地位相同，

$$E_2=\frac{\langle\phi|H_2|\phi\rangle}{N}=\langle\phi|H_2'|\phi\rangle+2\langle\phi|H_2''|\phi\rangle=E_2'+2E_2'' \tag{17}$$

$$H_2'=-\frac{\alpha_e^2}{2N}\left[\frac{\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{p}_2}{r_{12}}+\frac{\boldsymbol{r}_{12}\cdot(\boldsymbol{r}_{12}\cdot\boldsymbol{p}_1)\boldsymbol{p}_2}{r_{12}^3}\right] \tag{18}$$

$$H_2''=\frac{\alpha_e^2}{2N}\left[\frac{\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{p}_3}{r_1}+\frac{\boldsymbol{r}_1\cdot(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{p}_1)\boldsymbol{p}_3}{r_1^3}\right] \tag{19}$$

在循环坐标系中计算，

$$E_2'=-\frac{4\alpha_e^2\alpha^3}{N'}\int_0^\infty e^{-u}du\int_0^\infty e^{-v}dv\int_0^\infty e^{-w}dw\,\frac{T'\cdot F}{(u+v)^2} \tag{20}$$

T' 为 $u^av^bw^c$ 的多项式，利用 [10] 中公式可求 E_2'. 作类似处理可得 E_2''

$$E_2''=\frac{\alpha_e^2\alpha^3}{4N'}\int_0^\infty e^{-u}du\int_0^\infty e^{-v}dv\int_0^\infty e^{-w}dw\,\frac{T''\cdot F}{(2v+w)^2} \tag{21}$$

T'' 也是 $u^a\,v^b\,w^c$ 的多项式. 由 (17) 式 E_2 可求.

3. 特征修正

$$E_3=\frac{\langle\phi|H_3|\phi\rangle}{N}=\frac{\pi\alpha_e^2}{N}[2\langle\phi|\delta(\boldsymbol{r}_2)|\phi\rangle-\langle\phi|\delta(\boldsymbol{r}_{12})|\phi\rangle] \tag{22}$$

$$\langle\psi|\delta(\boldsymbol{r}_2)|\psi\rangle=\int\psi^2(r_1,0)\,d\tau_1{}^{[10]}$$
$$=\pi\left(\frac{1}{\alpha^3}+\frac{3\beta}{\alpha^4}+\frac{6\gamma}{\alpha^5}+\frac{3\beta^2}{\alpha^5}+\frac{15\beta\gamma}{\alpha^6}+\frac{45\gamma^2}{2\alpha^7}\right)\tag{23}$$

$$\langle\psi|\delta(\boldsymbol{r}_{12})|\psi\rangle=\int\psi^2(r_1,r_1)d\tau_1{}^{[10]}=\frac{\pi}{8\alpha^3}\tag{24}$$

可求出

$$E_3=64\,\alpha_e^2\left(\frac{15}{16}\alpha^3+3\alpha^2\beta+6\alpha\gamma+3\,\alpha\beta^2+15\beta\gamma+\frac{45\gamma^2}{2\alpha}\right)$$
$$\Big/\left(32+140\frac{\beta}{\alpha}+96\frac{\gamma}{\alpha^2}+192\frac{\beta^2}{\alpha^2}+308\frac{\beta\gamma}{\alpha^3}+288\frac{\gamma^2}{\alpha^4}\right)\tag{25}$$

4. 自旋修正

自旋磁矩相互作用引起的能量修正值

$$E_4=\frac{\langle\psi|H_4|\psi\rangle}{N}=\frac{2\pi\alpha_e^2}{N}\langle\psi|\delta(\gamma_{12})|\psi\rangle$$
$$=-\gamma\alpha_e^2\cdot\alpha^3\Big/\left(32+140\frac{\beta}{\alpha}+96\frac{\gamma}{\alpha^2}+192\frac{\beta^2}{\alpha^2}\right.$$
$$\left.+308\frac{\beta\gamma}{\alpha^3}+288\frac{\gamma^2}{\alpha^4}\right)\tag{26}$$
$$E_5=0$$

5. 虚湮灭修正

由 (13)、(15)、(23) 可得

$$E_6=\frac{3\pi\alpha_e^2}{N}\langle\psi|\delta(\boldsymbol{r}_2)|\psi\rangle$$
$$=96\,\alpha_e^2\left(\alpha^3+3\beta\alpha^2+6\alpha\gamma+3\alpha\beta^2+15\beta\gamma+\frac{45\gamma^2}{2\alpha}\right)\Big/\left(32\right.$$
$$\left.+140\frac{\beta}{\alpha}+96\frac{\gamma}{\alpha^2}+192\frac{\beta^2}{\alpha^2}+308\frac{\beta\gamma}{\alpha^3}+288\frac{\gamma^2}{\alpha^4}\right)\tag{27}$$

三、结果与讨论

采用正交试验法求 (6) 式最小值(记为 E_0)。

取正交表 $L_{25}(5^3)$ 如表 1，通过 7 组五位级运算（见表 2）以及进一步的循环比较运算，得到

$$\alpha=0.422,\ \beta=0.0600,\ \gamma=0.0422\tag{28}$$
$$E_0=-0.2571\ \text{a. u.}=-6.996\ \text{eV}\tag{29}$$

β 在第 6、7 组试验中取值的波动，表明 E 对 β 的依赖较弱，这与 Hylleraas 的结论[2]是一致的。

表1 位级排列 $L_{25}(5^3)$

试验号 \ 因素 / 列号	α 1	β 2	γ 3
1	1	1	2
2	2	1	5
3	3	1	4
4	4	1	1
5	5	1	3
6	1	2	3
7	2	2	2
8	3	2	5
9	4	2	4
10	5	2	1
11	1	3	1
12	2	3	3
13	3	3	2
14	4	3	5
15	5	3	4
16	1	4	4
17	2	4	1
18	3	4	3
19	4	4	2
20	5	4	5
21	1	5	5
22	2	5	4
23	3	5	1
24	4	5	3
25	5	5	2

使用定出的变分参数,根据各项相对论修正的表示式,算出各项修正量分别为

$$E_1 \doteq -7.085 \times 10^{-6}\,\text{a.u.} = -1.928 \times 10^{-4}\,\text{eV}$$

$$E_2 \doteq -4.508 \times 10^{-6}\,\text{a.u.} = -1.227 \times 10^{-4}\,\text{eV}$$

$$E_3 \doteq 1.126 \times 10^{-5}\,\text{a.u.} = 3.064 \times 10^{-4}\,\text{eV}$$

$$E_4 \doteq -3.048 \times 10^{-7}\,\text{a.u.} = -8.294 \times 10^{-6}\,\text{eV}$$

$$E_5 = 0\,\text{eV}$$

$$E_6 \doteq 1.711 \times 10^{-5}\,\text{a.u.} = 4.656 \times 10^{-4}\,\text{eV}$$

总的相对论修正量

$$E' = \sum_{i=1}^{6} E_i = 4.482 \times 10^{-4}\,\text{eV}$$

E_0 与公认值相对偏差 $\eta = \frac{7.129 - 6.996}{7.129} \times 100\% \doteq 2\%$ 反映所用波函数近似程度,而 $\eta \cdot E' \doteq 0.09 \times 10^{-4}\,\text{eV}$ 故取 E' 保留两位有效数字,即: $E' \doteq 4.5 \times 10^{-4}\,\text{eV}$ 相对论修正使能级升高。

表 2　位级取值(参数参考值[2] $\alpha = 0.5$, $\beta = \gamma = 0.05$)

组号	因素 \ 位级号	1	2	3	4	5
1	α	0.1	0.3	0.5	0.7	1.0
	β	0.00	0.03	0.05	0.07	0.10
	γ	0.00	0.03	0.05	0.07	0.10
2	α	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7
	β	0.05	0.06	0.07	0.08	0.10
	γ	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07
3	α	0.30	0.35	0.40	0.45	0.50
	β	0.050	0.055	0.060	0.065	0.070
	γ	0.030	0.035	0.040	0.045	0.050
4	α	0.35	0.38	0.40	0.42	0.45
	β	0.060	0.063	0.065	0.067	0.070
	γ	0.035	0.038	0.040	0.042	0.045
5	α	0.40	0.41	0.42	0.43	0.45
	β	0.060	0.062	0.063	0.064	0.065
	γ	0.040	0.041	0.042	0.043	0.045
6	α	0.410	0.415	0.420	0.425	0.430
	β	0.0630	0.0635	0.0640	0.0645	0.0650
	γ	0.0410	0.0415	0.0420	0.0425	0.0430
7	α	0.415	0.418	0.420	0.422	0.425
	β	0.0625	0.0628	0.0630	0.0632	0.0635
	γ	0.0420	0.0423	0.0425	0.0427	0.0430

本文相对论修正的计算忽略了 α_e 三阶以上的效应。在这些效应中，Lamb 移动 E_L 贡献最大．若以 H^- 系统基态的 Lamb 移动计算公式[10,12]近似计算 E_L，则知其具有不大于 10^{-6} eV 量级，在修正量的误差范围之内，其它高阶效应则更小．

因为相对论修正量很小 ($\sim 10^{-4}$ eV)，对要求精度不高的情况，只用变分法确定基态能级即可．但随着实验精度的提高，对相对论效应就必须加以考虑．

参　考　文　献

[1] J. A. Wheeler, *Ann. N. Y. Acad. Sci.*, **48**(1946), 219.
[2] E. A. Hylleraas, *Phys. Rev.*, **71**(1947), 491.
[3] W. Kolos, C. C. J. Rothaan and R. A. Sack, *Rev. Mod. Phys.*, **32**(1960), 178.
[4] A. A. Frost, M. Inokuti and J. P. Lowe, *J. Chem. Phys.*, **41**(1964), 482.
[5] S. Berko and H. N. Pendleton, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.*, **30**(1980), 543.
[6] A. P. Mills, *Phys. Rev. Lett.*, **46**(1981), 717.
[7] H. S. W. Massey, "Negative Ions", Cambridge (1950).
[8] 金松寿，"量子化学基础及其应用" (1980).
[9] P. 高姆巴斯，"量子力学中的多粒子问题" (1959).
[10] C. L. Pekeris, *Phys. Rev.*, **112**(1958), 1649.
[11] 赵光达，"重夸克(层子)偶素的非相对论势模型"，杭州粒子物理讨论会 (1984).
[12] H. A. Bethe and E. E. Salpeter, "Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms", (1957).

THE RELATIVISTIC CORRECTIONS FOR GROUND STATE ENERGY OF THE POSITRONIUM NEGATIVE ION

HE MING-KE RAO JIAN-XI LIN DA-HANG

(Beijing University of Steel and Iron Technology)

ABSTRACT

The ground state energy of the positronium negative ion is calculated by using the variational method. The relativistic corrections (to the order of V^2/C^2) are calculated. The value of the correction $E'' = 4.5 \times 10^{-4}$ eV is obtained for the ground state energy.