REVISTA CUBANA DE FÍSICA Vol. VII, No. 3, 1987

Transiciones entre niveles hidrogenoides Dirac-degenerados considerando correcciones radiativas

M.A. Braun, Cátedra de Teoría del Núcleo y Partículas Elementales, Universidad Estatal de Leningrado
J.J. Parera, Departamento de Física General y Teórica, Universidad de Oriente

RESUMEN

Se muestra que al incluir primeras correcciones radiativas, como consecuencia de la invarianza de calibración, en el primer orden no nulo, la probabilidad de transición entre niveles hidrogenoides Dirac-degenerados, puede expresarse mediante la fórmula usual para transición E1 (eléctrica dipolar) con el elemento matricial del operador coordenada entre los estados Dirac en cuestión. Se calcula una expresión general para dicha probabilidad.

ABSTRACT

We show that when the first radiative corrections are included, as a consecuence of the gauge invariance, in the first order not null, the probability of transition between Dirac-degenerate hydrogenic levels, may be expresed by the usual formula for the E1 transition with the matrix element of the coordinate operator between the respective Dirac states. A general formula for this probability is calculated.

INTRODUCCIÓN

El cálculo de la probabilidad de transición entre niveles hidrogenoides no relativistas, degenerados en ausencia de interacción con campos débiles adicionales al de Coulomb nuclear, no presenta dificultades esenciales. El elemento matricial de transición $\langle\varphi_2|\vec{v}\ \exp(-i\vec{k}\cdot\vec{r})|\varphi_1\rangle$ debe calcularse con las funciones de onda exactas φ, autoestados del hamiltoniano exacto (que incluye las interacciones adicionales): $H\varphi = E\varphi$. En este caso la aproximación dipolar está muy justificada, pues $k = E_2 - E_1 \cong E_2^\circ - E_1^\circ = 0$ (usamos unidades en que $h = c = 1$ y el supra cero indica el estado correspondiente no perturbado) al ser estados degenerados. En esta aproximación el elemento matricial de transición se reduce a $\langle\varphi_2|\vec{v}|\varphi_1\rangle$; si aquí sustituimos $\varphi_1 \cong \varphi_1^\circ$ $\varphi_2 \cong \varphi_2^\circ$ dicho elemento se anula, por ello su contribución no nula surge de las correcciones $\delta\varphi = \varphi - \varphi^\circ$ a las funciones de onda inicial y final. Existe un enfoque más sencillo que parte de la ecuación del movimiento de Heisemberg

$$\vec{v} = i[H,\vec{r}] \tag{1}$$

mediante la cual transformamos y aproximamos el elemento matricial

$$\langle\varphi_2|\vec{v}|\varphi_1\rangle = (E_2-E_1)\ \langle\varphi_2|i\vec{r}|\varphi_1\rangle \simeq (E_2-E_1)\langle\varphi_2^\circ|i\vec{r}|\varphi_1^\circ\rangle$$

de donde se ve que para transiciones entre niveles degenerados resulta "más exacta" la expresión del elemento matricial en la forma coordenada, pues mantiene su utilidad aún en el caso de niveles muy cercanos.

El objetivo del presente trabajo es generalizar este resultado al caso relativista, cuando la interacción causante del desdoblamiento de los niveles Dirac-degenerados es con el campo cuantizado de radiación (correcciones radiativas). Tal generalización no es inmediata, pues en este caso no es posible describir el electrón mediante un hamiltoniano con sólo interacciones locales. No obstante, como mostraremos, a consecuencia de la invarianza de calibración, al incluir correcciones radiativas al operador vértice de emisión de un fotón junto a las de las funciones de onda Dirac-Coulomb ψ de los estados inicial y final, resulta que, como en el caso no relativista, es posible calcular la probabilidad de transición en cuestión con el elemento matricial en la forma coordenada

$$\Delta E\ \langle\psi_2|i\vec{r}|\psi_1\rangle$$

donde ΔE es el corrimiento Lam entre los niveles. Finalmente, usando resultados de la teoría de momentos angulares, calculamos una fórmula general para la probabilidad de transición entre dos estados hidrogenoides degenerados cualesquiera.

AMPLITUD DE PROBABILIDAD DE TRANSICIÓN ENTRE NIVELES HIDROGENOIDES DEGENERADOS INCLUYENDO CORRECCIONES RADIATIVAS

En el primer orden la amplitud de probabilidad de transición con emisión de un fotón de polarización $\vec{e}$ y vector de onda $\vec{k}$ es proporcional a la contribución del diagrama D1, figura 1, /1/

$$D1 = -ie\ \vec{e}^{\,*}\cdot\langle|\psi_2|\vec{\alpha}\ \exp(-ik\cdot r)|\psi_1\rangle \tag{2}$$

que es la generalización de la expresión no relativista al caso relativista.

Las primeras correcciones radiativas corresponden a la inclusión de efectos radiativos en las funciones de onda iniciales y finales esquematizados en los diagramas D2-D5, figura 2, con contribuciones

$$D2= \langle\psi_2|-ie\vec{\alpha}\cdot\vec{e}^*\exp(-i\vec{k}\cdot\vec{r})iG(\vec{r},\vec{r}';E_1)(-i)\Sigma(\vec{r}',\vec{r}'';E_1)|\psi_1\rangle \quad (3)$$

$$D3= \langle\psi_2|-i\ \Sigma(\vec{r},\vec{r}';E_2)iG(\vec{r}',\vec{r}'';E_2)(-ie)\vec{\alpha}\cdot\vec{e}^*\exp(-i\vec{k}\cdot\vec{r})|\psi_1\rangle \quad (4)$$

$$D4= \langle\psi_2|-ie\vec{\alpha}\cdot\vec{e}^*\exp(-i\vec{k}\cdot\vec{r})iG(\vec{r},\vec{r}';E_1)(-i)P(\vec{r}')|\psi_1\rangle \quad (5)$$

$$D5= \langle\psi_2|-iP(\vec{r})iG(\vec{r},\vec{r}';E_2)(-ie)\vec{\alpha}\cdot\vec{e}^*\exp(-i\vec{k}\cdot\vec{r})|\psi_1\rangle \quad (6)$$

y en el operador vértice ilustrado en el diagrama D6, figura 2, con contribución

$$D6 = |\psi_2|-ie\vec{\Lambda}^{(3)}(\vec{k})\ \cdot\vec{e}^*\exp(-i\vec{k}\cdot\vec{r})|\psi_1\rangle \quad (7)$$

En estas expresiones $e = -|e|$ es la carga del electrón, $\vec{\alpha}$ la conocida matriz de Dirac, G el propagador unielectrónico, Σ el operador automasa del electrón, P el operador correspondiente a la primera corrección radiativa por polarización del vacío al potencial coulombiano, $\Lambda^{(3)}$ el operador vértice de 3er orden /2/.

Considerando la pequeñez de $k = |\vec{k}|$ para transiciones entre niveles degenerados, la principal contribución de estos diagramas la obtenemos evaluando para $k = 0$, en este caso considerando la relación

$$\vec{\alpha} = i[H_o,\vec{r}] \quad (8)$$

donde H_o es el hamiltoniano de Dirac, se ve que la contribución de (2) se anula.

Sustituyendo en (3) y (4) la representación espectral del propagador unielectrónico /2/

$$G(\vec{r},\vec{r}';E) = S_n \frac{\psi_n(\vec{r})\bar{\psi}_n(\vec{r}')}{E-E_n^o + i0}$$

donde S_n simboliza sumación en el índice n, y usando (8) obtenemos:

$$(3) = -ie\ \vec{e}^*\cdot S_n \frac{i(E_2^o-E_n^o)\vec{r}_{2n}}{E_1-E_n^o}\Sigma_{n1} \cong -ie\ \vec{e}^*\cdot \underset{(\neq 1,2)}{S_n}\ i\vec{r}_{2n}\Sigma_{n1} \quad (9)$$

$$(4) = -ie\cdot\vec{e}^*\cdot S_n\Sigma_{2n}\frac{i(E_n^o-E_1^o)\vec{r}_{n1}}{E_2-E_n^o} \cong -ie\ \vec{e}\cdot \underset{(\neq 1,2)}{S_n}\ \Sigma_{2n}\ i\vec{r}_{n1} \quad (10)$$

los subíndices indican elementos matriciales entre los estados subnumerados. En la última igualdad aproximamos $E_i \cong E_i^o$ $(i=1,2)$ y hemos considerado el carácter degenerado de los niveles, aquí E_i^o es la energía del electrón Dirac y E_i la energía incluyendo además correcciones radiativas. Para los términos en que tal aproximación anula el denominador, mantenemos el valor exacto E_i, estos términos se anulan al anularse el numerador; así se anulan las contribuciones de los términos n = 1,2, que descontamos explícitamente. En cuanto a (7) usando la expresión del operador vértice de tercer orden

$$\Lambda^{(3)}(\vec{k}) = e^2 \int \frac{d^4k'}{(2\pi)^4 i(k'^2+i0)} S_{n,r} \frac{(\gamma_\mu \exp(i\vec{k}'\cdot\vec{r})_{2n}(\vec{\alpha}\exp(-i\vec{k}\cdot\vec{r}))_{nr_x}}{(E-k_0'-E_n^\circ+i0)}$$

$$\times \frac{(\gamma^\mu \exp(-i\vec{k}'\cdot\vec{r}))_{r1}}{(E-k_o'-E_r^\circ+i0)}$$

evaluando en k=0 y usando (8)

$$(\vec{\alpha})_{nr} = i\vec{r}_{nr}((E_n^\circ-E+k_o')-(E_r^\circ-E+k_o'))$$

entonces podemos transformar

$$\Lambda^{(3)}(\vec{k}=0) = -\, i\vec{r}\ \Sigma\ (\vec{r},\vec{r}\,';E) + i\vec{r}\,'\ \Sigma(\vec{r},\vec{r}\,';E)$$

con lo cual ponemos (7) en la forma

$$(7) = -\, ie\ \vec{e}^*\cdot S_n(-i\vec{r}_{2n}\Sigma_{n1} + i\ \Sigma_{2n}\ \vec{r}_{n1}) \tag{11}$$

La contribución total de los diagramas D2, D3, D6

$$(9)+(10)+(11) = -\ ie\ \vec{e}^*\cdot(\underset{n\neq 1,2}{S_n}(i\vec{r}_{2n}\Sigma_{n1})-S_n(i\vec{r}_{2n}\Sigma_{n1}) - \underset{n\neq 1,2}{S_n}(i\Sigma_{2n}\vec{r}_{n1})+S_n(i\Sigma_{2n}\vec{r}_{n1}))$$

$$= -ie\ \vec{e}^*\cdot(\Sigma_{22} - \Sigma_{11})ir_{21}$$

donde usamos la diagonalidad de Σ en otros números cuánticos distintos al principal.

Análogamente transformamos (5) y (6) para $\vec{k} = 0$, usando (8) y con aproximaciones del tipo usado en la obtención de (9) y (10), obtenemos

$$(5) = -\ ie\ \vec{e}^*\cdot\ \underset{n\neq 1,2}{S_n}\ i\vec{r}_{2n}P_{n1} \tag{13}$$

$$(6) = -(-ie)\vec{e}^*\cdot S_n P_{2n} i\vec{r}_{n1} \tag{14}$$

La contribución total de los diagramas D4 y D5 considerando la conmutatividad de $\vec{r}$ y P, y la diagonalidad de P entre estados con números cuánticos distintos al principal

$$(13)+(14) = -ie\ \vec{e}^*\cdot(P_{22}-P_{11})i\vec{r}_{21} \tag{15}$$

La contribución total del primer orden no nulo

$$(12)+(15) = -ie\ \vec{e}^*\cdot(E_L(2)-E_L(1))i\vec{r}_{21} \tag{16}$$

donde $E_L(i)$ es el corrimiento Lamb del estado i.

FÓRMULA PARA LA PROBABILIDAD DE TRANSICIÓN

Como es conocido los niveles hidrogenoides-Dirac con número cuántico n_r no nulo son 2-degenerados, corresponden a los autoestados $|njlm\rangle$, $l=j\pm\frac{1}{2}$. Dichos estados son de paridad opuesta, por ello entre los mismos el elemento matricial de $\vec{r}$ es en general no nulo. La probabilidad de transición entre dos estados cualesquiera de estos es proporcional a

$$w_o = (2j+1)^{-1} S_n |\langle nj(j+\tfrac{1}{2})m|\vec{r}|nj(j-\tfrac{1}{2})m\rangle|^2 \tag{17}$$

donde se suma a las proyecciones del momento angular total final y se promedia a las iniciales.

Consideremos aparte el elemento matricial

$$M = \langle nj'l'm'|\vec{r}|njlm\rangle \tag{18}$$

La función de onda Dirac-Coulomb

$$|njlm\rangle = \begin{pmatrix} G^+_{njl}(r)\Omega_{jlm}(\vec{n}) \\ G^-_{njl}(r)\Omega_{j\bar{l}m}(\vec{n}) \end{pmatrix}$$

donde $\Omega_{jlm}(\vec{n}) = S_{m_1,m_2} C^{jm}_{lm_1,\frac{1}{2}m_2} Y^{m_1}_l(\vec{n}) v_{m_2}$; $\bar{l}=2j-l$, aquí los C's son los coeficientes de Clebsh-Gordan, Y^m_l las funciones esféricas y v_m el espinor de Pauli con proyección de espín m. Las funciones radiales G^+, G^- pueden expresarse mediante funciones hipergeométricas /1/, nosotros preferimos una expresión equivalente mediante polinomios de Laguerre

$$G^{\pm}(r) = \frac{-\sqrt{\dfrac{m\pm E}{4mN(N-\varkappa)}}}{\sqrt{n!\,\Gamma(2\gamma+n_r+1)}} \left(\frac{2m\alpha Z}{N}\right)^{3/2} \rho^{\gamma-1}\exp(-\rho/2)\left\{n_r(2\gamma+n_r)L^{(2\gamma)}_{n_r-1}(\rho) \mp \mp (N-\varkappa)L^{(2\gamma)}_{n_r}(\rho)\right\}$$

donde E es la energía del estado, la conocida función gamma de Euler,

$$\varkappa = \begin{cases} j=l+\frac{1}{2} \longrightarrow -(j+\frac{1}{2}) = -(l+1) \\ j=l-\frac{1}{2} \longrightarrow +(j+\frac{1}{2}) = +l \end{cases}$$

$N = \sqrt{n^2-2n_r(|\varkappa|-\gamma)}$, $n = n_r+|\varkappa|$, $\gamma^2 = \varkappa^2-Z^2\alpha^2$, $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$ es la conocida constante de estructura fina (en unidades corrientes).

En (18) podemos separar la integración radial de la angular

$$M=\langle r\rangle_+ \langle j'l'm'|\vec{n}|jlm\rangle+\langle r\rangle_- \langle j'\bar{l}'m'|\vec{n}|j\bar{l}m\rangle \tag{19}$$

aquí

$$\langle r\rangle_{\pm} = \int_0^\infty r^2 dr\, rG^{\pm}_{nj'l'}(r)\, G^{\pm}_{njl}(r)$$

$$\langle j'l'm'|\vec{n}|jlm\rangle = \int do\Omega_{j'l'm'}(\vec{n})\vec{n}\Omega_{jlm}(\vec{n})$$

Efectuemos la integración angular

$$\langle j'l'm'|\vec{n}|jlm\rangle = \underset{m_1'm_2'}{S}\ \underset{m_1 m_2}{S}\ C^{j'm'}_{l'm_1',\frac{1}{2}m_2'}\ C^{jm}_{lm_1,\frac{1}{2}m_2}\ \delta_{m_2 m_2'}\ \langle Y^{m_1'}_{l'}|\vec{n}|Y^{m_1}_{l}\rangle$$

usando coordenadas cíclicas

$$\vec{n} = (n_\mu)\ ,\ \mu = 0,\ \pm 1,\ \text{donde}\ n_\mu = \sqrt{4\pi/3}\ \ Y^\mu_1\ (\vec{n})$$

y las identidades /3/

$$\int doY^{m_1}_{l_1}(\vec{n})Y^{m_2}_{l_2}(\vec{n})Y^{m_3}_{l_3}(\vec{n})^* = \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l_3+1)}}\ C^{l_3 0}_{l_1 0,l_2 0}\ C^{l_3 m_3}_{l_1 m_1,l_2 m_2}$$

$$\underset{\alpha\beta\delta}{S}\ C^{c\gamma}_{a\alpha,b\beta}C^{e\varepsilon}_{d\delta,b\beta}C^{d\delta}_{a\alpha,f\varphi} = (-1)^{b+c+d+f}\sqrt{(2c+1)(2d+1)}\ C^{e\varepsilon}_{c\gamma,f\varphi}\begin{Bmatrix} a & b & c\\ e & f & d\end{Bmatrix}$$

donde entre llaves aparece el símbolo 6-j. Se obtiene

$$M = C^{j'm'}_{jm,1\mu}\left\{\langle r\rangle_+ v_{j'l'jl} + \langle r\rangle_- v_{j'\bar{l}'j\bar{l}}\right\}$$

aquí $v_{j'l'jl} = \sqrt{(2+1)(2l+1)}\ C^{l'0}_{10,l0}\ (-1)^{j+l'+3/2}\begin{Bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & j\\ j & 1 & l'\end{Bmatrix}$

En el cálculo de w_o, (17), empleamos las identidades

$$(2j+1)^{-1}S_{mm'}C^{j'm'}_{jm,1\mu}C^{j'm'}_{jm,1\mu} = (2j+1)^{-1}S_{m'}1 = (2j+1)^{-1}(2j'+1)$$

entonces

$$w_o = \left[\langle r\rangle_+ v_{jl'jl} + \langle r\rangle_- v_{j\bar{l}'j\bar{l}}\right]^2$$

Usando tablas /3/ para coeficientes de Clebsh-Gordan y símbolos 6-j obtenemos

$$v_{jl'jl} = v_{j\bar{l}'j\bar{l}} = \frac{-1}{\sqrt{2\ j(j+1)}}$$

finalmente

$$w_o = -\frac{(\langle r\rangle_+ + \langle r\rangle_-)^2}{4j(j+1)} \qquad (20)$$

Efectuemos la integración radial. Las integrales radiales que expresan $\langle r\rangle_\pm$ se reducen a integrales del tipo

$$I_{mn} = \int_0^\infty \rho^{k+1}d\rho\ \exp(-\rho)L^{(k)}_m(\rho)L^{(k)}_n(\rho)$$

pero

$$\int_0^\infty \rho^k d\rho \, \exp(-\rho) L_m^{(k)}(\rho) L_n^{(k)}(\rho) = n!\Gamma(k+n+1)\delta_{nm}$$

y usando fórmulas de recurrencia para polinomios de Laguerre arribamos a

$$I_{mn} = m!\Gamma(k+m+1)[(2n+k+1)\delta_{mn} - \delta_{m(n+1)} - n(n+k)\delta_{m(m-1)}]$$

y se obtiene

$$\langle r\rangle_\pm = \left[n_r!\Gamma(2\gamma+n_r+1)\right]^{-1} \frac{\sqrt{m\pm E}}{4m\sqrt{N^2-\chi^2}} (2m\alpha Z)^{-1}\left[n_r^2(2\gamma+n_r)^2 I_{(n_r-1)(n_r-1)}\right.$$

$$\left. + (N^2-\chi^2) I_{n_r n_r} \mp 2Nn_r(2\gamma+n_r) I_{n_r(n_r-1)}\right]$$

de donde sigue

$$\langle r\rangle_+ + \langle r\rangle_- = (2m\alpha Z)^{-1} 3(n_r+\gamma)\sqrt{n_r(n_r+2\gamma)} \tag{21}$$

Sustituyendo (21) en (20)

$$w_o = \frac{9(n_r+\gamma)^2 n_r(n_r+2)}{16j(j+1)(m\alpha Z)^2}$$

La probabilidad de transición obtenida sumando en las polarizaciones del fotón emitido e integrando en sus direcciones

$$P(njl \rightarrow njl') = 4/3 \, |\Delta E_L|^3 w_o$$

donde $\Delta E_L = E_L(2) - E_L(1)$ es el corrimiento Lamb entre los niveles degenerados en cuestión.

CONCLUSIONES

Considerando que $\Delta E_L \sim \alpha(\alpha Z)^4 m$ se ve que la probabilidad de transición calculada es pequeña. Calculemos como ejemplo dicha probabilidad para la transición entre los niveles $2s_{1/2}-2p_{1/2}$, que corresponden a $j = 1/2$, $n_r = 1$, en el caso de Z no muy elevada, entonces $\gamma \cong 1$. Entonces

$$w_o \cong {}^9/(Zm\alpha)^2$$

Como la separación de estos niveles por corrimiento Lamb es /2/

$$E_L = 0.41\alpha^5 m \, Z^4$$

obtenemos para la probabilidad en cuestión

$$P(2s_{1/2}-2p_{1/2}) \cong \alpha^4 m(\alpha Z)^{10} 0.83$$

Compárese con las probabilidades de transición entre los niveles de estructura fina n=2 /4/

$$P(2p_{3/2}-2s_{1/2}) = \alpha\, m(\alpha Z)^{10} 3(2)^{-13}$$

$$P(2p_{3/2}-2p_{1/2}) = \alpha\, m(\alpha Z)^{12} 3^{-2}(2)^{-14}$$

El resultado obtenido en el presente trabajo para transiciones entre niveles Dirac-degenerados de iones hidrogenoides, ha sido extendido por los autores al caso de iones helioides de Z elevada, en los cuales es adecuada la aproximación inicial de electrones Dirac no interactuantes entre sí, incluyendo junto a las primeras correcciones radiativas unielectrónicas, las primeras correcciones en la interacción interelectrónica. En ese caso la separación entre niveles degenerados incluye además del corrimiento radiativo, los efectos de la interacción entre electrones, y la probabilidad de transición crece notoriamente.

BIBLIOGRAFÍA

1. Berestetskii, V.B.; E.M. Lifshitz; L.P. Pitaevskii
Teoría Cuántica Relativista, parte 1, Ed. Reverté (1971).

2. Lifshitz, E.M.; L.P. Pitaevskii
Teoría Cuántica Relativista, parte 2, Ed. Reverté (1974).

3. Varshalovich, D.A.; A.N. Moskaliev, V.K. Kersonskii
Teoría Cuántica del Momento Angular, Ed. Nauka (1975), en ruso.

4. Viktorov, D.S.; S.A. Zapriagaev; V.G. Palchikov
Preprint ISAN, No. 13, Troitsk (1977), en ruso.

Recibido: 18 de julio de 1986.