^{专题: 少电子原子分子精密谱} 原子兰姆位移与超精细结构中的核结构效应^{*}

计晨1)2)†

1) (华中师范大学粒子物理研究所,夸克与轻子物理教育部重点实验室,武汉 430079)

2) (中国科学院近代物理研究所南方核学科理论中心, 惠州 516000)

(2024年7月31日收到; 2024年9月8日收到修改稿)

精密原子光谱实验和理论在测量基本物理常数和检验量子电动力学理论中起着关键作用,同时为研究 原子核内部结构和发展高精度核结构理论提供重要观测平台.许多原子光谱实验中,核结构效应如电荷分 布、磁矩分布和核极化度已被精确测定,大大提高了核结构检测的精度.本文系统论述了关于轻质量电子原 子与缪子原子兰姆位移和超精细结构中的双光子交换效应的理论框架与研究发展.着重介绍了先进的核力 模型和核结构第一性原理计算方法在上述问题中的应用.轻质量原子中双光子交换效应的理论研究对于从 原子光谱测量中确定核电荷半径和 Zemach 半径具有重要作用.这些研究结果不仅能加深对原子核内部结构 以及核子-核子相互作用的理解,还为未来实验提供重要的理论指导,推进对质子半径难题以及其他轻核半径 测量问题的理解.

关键词:双光子交换,第一性原理方法,兰姆位移,超精细结构 PACS: 21.45.-v, 21.60.De, 25.20.-x, 36.10.Ee CSTR: 32037.14.aps.73.20241063

DOI: 10.7498/aps.73.20241063

1 引 言

原子精密光谱实验与理论的发展在测量基本 物理常数和检验量子电动力学 (quantum electrodynamics, QED) 理论中发挥关键作用, 同时也为 研究原子核内部结构与发展高精度核结构理论 提供了重要的观测平台. 近十年来, 随着原子光谱 测量精度的不断提高, 核电荷分布、磁矩分布、核 极化度等核结构效应在许多原子精密光谱实验 中得到了精确测定, 从而显著提升了核结构探测的 精度.

传统测量质子电荷半径的方法主要依赖于普 通氢原子光谱和电子-质子散射数据^[1]. 2010 年至 2013 年间,瑞士保罗·谢勒研究所 (PSI) 的 CRE-MA (charge radius experiment with muonic atoms) 合作组通过测量缪氢原子 (μH) 兰姆位移, 首次 获得质子电荷半径的新值 0.84087(39) fm^[2,3], 其 精确度比原有实验提高约 1 个数量级, 但数值 比 CODATA 2010 推荐值小 4%, 相差 7 个标准 差. 这一发现被称为"质子半径难题", 对传统实验 与 QED 理论的精确性提出了挑战, 并推动了测量 核电荷和磁矩分布的新实验研究. CODATA 2014 更新后, 这一分歧缩小至 5.6 个标准差^[4].

质子半径难题引发了广泛的研究兴趣,因为它 不仅影响对质子基本性质的理解,还指向新物理的 存在可能.为解决质子半径难题,研究者们提出并 实施多种新的实验方案,包括精确测量低动量转移 下的电子-质子散射^[5,6]、以及研究缪子-质子散射^[7]. 另一种方法是通过测量不同核电荷或质量数的缪 原子兰姆位移,研究其他轻核的均方根电荷半径 (*r*_E).通过系统比较电子-核与缪子-核系统中提取

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 12175083, 12335002, 11805078) 资助的课题.

[†] E-mail: jichen@ccnu.edu.cn

^{© 2024} 中国物理学会 Chinese Physical Society

的 *r*_E, 可以检验核电荷半径的测量差异是否在不同质子数 (*Z*)、中子数 (*N*) 或核质量数 (*A*) 的轻子-核系统中仍然存在甚至有所增加.

CREMA 合作组已开展一系列轻质量缪原子 兰姆位移实验,取得氘核半径难题的新发现^[8].同 时^{3,4}He 核电荷半径也在相关缪原子兰姆位移的光 谱测量中得到确定^[9,10].在兰姆位移测量中,核电 荷半径的准确性不仅依赖于实验精度,还取决于 QED 和核结构修正的计算精度.电子氢原子兰姆 位移的 QED 贡献主要来源于束缚态电子的自能 修正.与之不同的是,轻质量缪原子兰姆位移的 QED 修正主要由光子真空极化 (Uehling 效应)产生,并 且其 2S 和 2P 态的能级顺序与电子原子相反.由 于缪子的质量较重,它的原子轨道半径远小于电 子,因此缪原子兰姆位移的核结构修正比在电子原 子中显著增强.

缪原子兰姆位移与核电荷半径之间的关系可 表示为

$$E_{\rm LS} = E_{\rm QED} + \mathcal{A}_{\rm OPE} r_{\rm E}^2 + E_{\rm TPE}, \qquad (1)$$

其中 QED 贡献 E_{QED} 由光子真空极化、束缚态缪 子自能修正和相对论反冲修正组成,其领头阶 Uehling 效应的量级为 $\alpha(Z\alpha)^{2}$ ^[11].方程中的其他 两项来自核结构修正.与 r_{E}^{2} 成正比的项由缪子和 核之间的单光子交换主导,而 E_{TPE} 源自双光子交 换贡献,可以分为弹性与非弹性部分.

精密激光光谱技术的应用, 使得能够通过测量 原子跃迁, 深入了解核结构并检验束缚态 QED 的 准确性. 通过对轻质量缪原子兰姆位移测量, 获得 高精度的核电荷半径. 同时, 高精度的超精细结构 (hyperfine splitting, HFS) 测量为研究原子核磁矩 结构提供重要信息, 相关测量已经或将要在轻质量 电子原子 (如^{1,2}H, ³He, ^{6,7}Li)^[12–17] 以及相应的缪 原子中开展^[3,8,10,18–22]. HFS 主要由核磁矩与轻子 磁矩短程相互作用主导^[23–25], 因此它是研究原子 核磁结构的理想探针.

理论上,高精度 HFS 理论预测受限于由双光 子交换 (two-photon exchange, TPE) 过程所主导 的核结构效应修正.同理,超精细劈裂的主要贡献 可由如下公式表示:

$$E_{\rm HFS} = E_{\rm F} + E_{\rm QED} + E_{\rm TPE}, \qquad (2)$$

其中 E_{QED} 与 E_{TPE} 分别对应 HFS 的 QED 与 TPE 修正.与兰姆位移相似, TPE 修正可进一步分解为

弹性与非弹性贡献. 弹性 TPE 贡献由 Zemach 半 径表征, 来源于核电荷和磁密度的卷积, 而非弹性 TPE 修正则来自核极化.

由轻子-原子核 TPE 过程所产生的核结构效 应对原子能谱的修正至关重要.这不仅体现在缪原 子兰姆位移的测量上,也体现在电子原子与缪原 子 HFS 的测量中.通过对不同轻核及其缪原子的 兰姆位移和 HFS 的精密测量,可以深入分析核结 构效应,为提高核理论的预测精度和理解核力机制 提供重要的高精度实验平台.同时,结合量子多体 计算与先进核子-核子相互作用理论的原子核第一 性原理计算的发展,也为更加精确地预测原子能谱 中的 TPE 修正提供了理论工具.

本文接下来的内容将分为几个部分进行详细 阐述. 第2部分阐述轻质量原子兰姆位移与 HFS 中的 TPE 过程的理论基础. 第3部分介绍原子核 第一性原理计算在研究 TPE 效应中的应用. 第 4部分介绍核结构 TPE 理论研究的最新进展. 第 5部分, 总结本文的主要内容, 并展望未来在提升 实验精度和理论计算准确性方面的潜在研究方向 及其对核物理和新物理探索的意义.

2 兰姆位移与超精细结构中的双光子 交换效应

轻子-原子核系统中的 TPE 效应对原子能谱 在 α⁵ 量级产生贡献,如图 1 所示.考虑到相对论 效应,其对应的费曼图包括箱图、交叉图以及双光 子顶点图 (海鸥图). TPE 对原子能谱的贡献可 以分为两部分:一部分依赖于单个核子的基态与激 发态内部结构,称为单核子 TPE 效应 *E*_{1N};另一 部分依赖于原子核的整体结构与反应,称为核 结构 TPE 效应 *E*_{nucl},并可进一步分解为弹性与核 极化贡献项 *E*_{nucl} = *E*_{el} + *E*_{pol}.本文主要讨论核结 构 TPE 效应. 由此,原子能谱中 TPE 总贡献可表 示为

$$E_{\rm TPE} = E_{\rm 1N} + E_{\rm el} + E_{\rm pol}.$$
 (3)

利用费曼规则, 与图 1 对应的算符在洛伦兹规 范下表示为^[26]

$$\mathcal{H}_{2\gamma} = iZ^2 (4\pi\alpha)^2 \phi_n^2(0) \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} \\ \times \frac{\eta_{\mu\nu} (q) T^{\mu\nu} (q, -q)}{(q^2 + i\epsilon)^2 (q^2 - 2m_1q_0 + i\epsilon)}, \qquad (4)$$



图 1 轻子-原子核系统中的双光子交换费曼图,从左至右依次对应箱图、交叉图与海鸥图.波浪线、细直线、粗直线与椭圆分别 对应光子、轻子、核基态与核激发态

Fig. 1. Two-photon exchange diagrams in lepton-nucleus systems. The diagrams from left to right are respectively the box, cross and seagull diagrams. Wiggled, thin-straight, thick-straight lines and ellipse represent respectively the photon, lepton, nuclear ground state and nuclear excited states.

其中 η 和*T*分别代表轻子和原子核的张量, $\phi_n(0) = \sqrt{\alpha^3 m_r^3/n^3 \pi}$ 是原子*n*S态在原点处的波函数.*m*₁与*m*_r = *m*₁*M*/(*m*₁ + *M*)分别为轻子的静止质量与其在原子系统中的约化质量.*T*对应原子核的前向虚康普顿散射振幅^[27]:

$$T_{\mu\nu}(q, -q) = \text{seagull} + \sum_{N} \left\{ \frac{\langle N_0 | J_\mu(0) | Nq \rangle \langle Nq | J_\nu(0) | N_0 \rangle}{E_0 - E_N + q_0 + i\epsilon} + \frac{\langle N_0 | J_\nu(0) | N - q \rangle \langle N - q | J_\mu(0) | N_0 \rangle}{E_0 - E_N - q_0 + i\epsilon} \right\}, \quad (5)$$

其中 J为原子核电磁流算符, $|N_0\rangle 与 |Nq\rangle$ 分别代 表核基态与 TPE 过程中的核中间态; E_0 与 E_N 为 相应的原子质心坐标系下本征能量. 在计算 TPE 的弹性贡献时, 中间态保持原子核基态, 本征能 $E_N = q^2/(2M)$ 对应 TPE 中间过程的核反冲动能, M为原子核质量. 在计算核极化效应时, 中间态包 括除基态外的所有满足电磁激发选择定则的核 激发态和连续谱态. $\mathcal{H}_{2\gamma}$ 算符产生对原子光谱的核 结构修正, 分别体现在对原子兰姆位移谱和超精 细结构谱能级的改变. 以下就这两种情况分别 展开讨论.

2.1 兰姆位移中的双光子交换效应

TPE 对兰姆位移的修正可利用算符 *H*_{2γ} 的微 扰计算获得.引入轻子自旋 *z* 分量平均后,相应的 轻子张量可约化为^[27]

 $\eta_{\mu\nu}(q) = (k \cdot q)g_{\mu\nu} + (k - q)_{\mu}k_{\nu} + k_{\mu}(k - q)_{\nu},$ (6) 其中 $k = (m_{1}, 0)$ 为近似静止的轨道轻子四动量.将 其表达式代入 (4) 式进行进一步计算,可获得 TPE 效应对兰姆位移的能量修正^[27]:

$$E_{\text{TPE}} = Z^2 (4\pi\alpha)^2 \phi_n^2 (0) \text{ Im} \left\{ \int \frac{\mathrm{d}^4 q}{(2\pi)^4} \times \frac{2m_{\text{I}}}{(q^2 + \mathrm{i}\epsilon)^2 - 4m_{\text{I}}^2 q_0^2} \left[\frac{1}{q^2} T_{\text{L}} + \frac{q_0^2}{(q^2 + \mathrm{i}\epsilon)^2} T_{\text{T}} \right] \right\}, \quad (7)$$

其中 $T_{\rm L} = T_{00}$ 与 $T_{\rm T} = (\delta_{ij} - q_i q_j / q^2) T_{ij}$ 对应原子 核向前虚康普顿振幅的纵向与横向极化部分. (7)式中的非弹性贡献项来自核的电磁极化,并体 现为核极化响应函数的求和规则计算^[27,28]:

$$E_{\text{pol}} = -8Z^{2}\alpha^{2}\phi_{n}(0)^{2}\int_{0}^{\infty} \mathbf{d} |\mathbf{q}| \int_{\omega_{\text{th}}}^{\infty} \mathbf{d}\omega$$

$$\times [K_{\text{L}}(\omega, |\mathbf{q}|) S_{\text{L}}(\omega, |\mathbf{q}|)$$

$$+ K_{\text{T}}(\omega, |\mathbf{q}|) S_{\text{T}}(\omega, |\mathbf{q}|)$$

$$+ K_{\text{S}}(\omega, |\mathbf{q}|) S_{\text{T}}(\omega, 0)]. \qquad (8)$$

变量 (ω , |q|) 是交换光子携带的四动量. S_L 和 S_T 分别是核纵向和横向极化响应函数:

$$S_{\mathrm{L,T}} = \sum_{N \neq N_0} \delta(\omega - E_N + E_0) |a \langle N | \mathcal{O}_{\mathrm{L,T}} | N_0 \rangle|^2, \quad (9)$$

其中电磁激发算符 $O_L = \rho(q)$ 和 $O_T = q \times J(q)/|q|$ 分 别与核电荷密度与电磁流密度相关. (8) 式中的积 分权重函数 K_L , $K_T = K_S$ 分别为^[27]

$$K_{\rm L}(\omega, |\mathbf{q}|) = \frac{1}{2E_{\rm q}} \bigg[\frac{1}{(E_{\rm q} - m_{\rm l})(\omega + E_{\rm q} - m_{\rm l})} - \frac{1}{(E_{\rm q} + m_{\rm l})(\omega + E_{\rm q} + m_{\rm l})} \bigg], \quad (10)$$

$$K_{\mathrm{T}}(\omega, |\boldsymbol{q}|) = -\frac{\omega + 2|\boldsymbol{q}|}{4m_{\mathrm{l}}|\boldsymbol{q}|(\omega + |\boldsymbol{q}|)^{2}} + \frac{\boldsymbol{q}^{2}}{4m_{\mathrm{l}}^{2}}K_{\mathrm{L}}(\omega, |\boldsymbol{q}|),$$
(11)

$$K_{\rm S}\left(\omega, |\boldsymbol{q}|\right) = \frac{1}{4m_{\rm l}\omega} \left(\frac{1}{|\boldsymbol{q}|} - \frac{1}{E_{\rm q}}\right), \qquad (12)$$

其中 $E_q = \sqrt{m_1^2 + q^2}$ 为轻子相对论能量.(8)式中 引入双光子顶点海鸥项,确保规范不变性并在动量 积分中减除|q| = 0处的发散.在库仑规范中,海鸥 项仅贡献于横向极化^[27]. (7)式中的弹性贡献部分由原子核电磁分布产生,其主要贡献项可表示为

$$E_{\rm el} = -8Z^2 \alpha^2 \phi_n \left(0\right)^2 \int_0^\infty \mathbf{d} \left| \boldsymbol{q} \right| \left[K_{\rm L} \left(\frac{\boldsymbol{q}^2}{2M}, \left| \boldsymbol{q} \right| \right) \times F_{\rm E}^2 \left(\boldsymbol{q}^2 \right) - \frac{2m_{\rm r}}{\boldsymbol{q}^4} + \frac{2m_{\rm r} r_{\rm E}^2}{3\boldsymbol{q}^2} \right], \qquad (13)$$

其中后两项减除积分在 $|\mathbf{q}| = 0$ 处的发散, 同时避 免单光子交换中非微扰部分的重复计算. $F_{\rm E}$ 为原 子核的电荷形状因子. 在 $M \to \infty$ 近似下, 该贡献 与 Zemach moment $\langle r_{\rm E}^3 \rangle_{(2)}$ 成正比^[26]:

$$E_{\rm el} \approx -m_{\rm r}^4 \frac{\alpha^5}{24} \left\langle r_{\rm E}^3 \right\rangle_{(2)} \\ = -m_{\rm r}^4 \alpha^5 \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\mathbf{d} |\mathbf{q}|}{\mathbf{q}^4} \left[F_{\rm E}^2 \left(\mathbf{q}^2 \right) - 1 + \frac{r_{\rm E}^2 \mathbf{q}^2}{3} \right].$$
(14)

2.2 超精细结构中的双光子交换效应

由于超精细结构 (HFS) 涉及轻子自旋与核自 旋的耦合, (4) 式中轻子张量可约化为仅与轻子自 旋相关的部分 $\tilde{\eta}^{\mu\nu} = iq_0 \epsilon^{0\mu\nu i} \sigma_i^{(1)} + i \epsilon^{\mu\nu i j} \sigma_i^{(1)} q_j$ ^[29]. 图 1 中海鸥图对应的核张量为 $B_{\mu\nu}$,其中电荷-电 流干涉项 B_{0m} 提供领头阶在 $1/M^2$ 量级的相对论 修正,而电流-电流项 B_{ij} 由于交叉对称性相互抵 消^[26,30].

由此可得到 TPE 对 HFS 修正的非弹性部分 贡献,并表示为核响应函数的求和规则^[29]:

$$E_{\text{pol}} = \frac{6\alpha\mu_{\text{l}}E_{\text{F}}}{\pi\mu_{I}} \int_{0}^{\infty} \mathbf{d} \left| \boldsymbol{q} \right| \int_{\omega_{\text{th}}}^{\infty} \mathbf{d}\omega \left[h^{(0)}(\omega, \left| \boldsymbol{q} \right|) \times S^{(0)}(\omega, \left| \boldsymbol{q} \right|) - h^{(1)}(\omega, \left| \boldsymbol{q} \right|) S^{(1)}(\omega, \left| \boldsymbol{q} \right|) \right], \quad (15)$$

其中核响应函数*S*⁽⁰⁾(*S*⁽¹⁾)由电荷(电流)算符与磁流算符之间的干涉项产生:

$$S^{(0)}(\omega, |\boldsymbol{q}|) = \operatorname{Im}\left\{\int \frac{\mathrm{d}\hat{q}}{4\pi\boldsymbol{q}^2} \sum_{N \neq N_0} \langle N_0 II | \rho(-\boldsymbol{q}) | N \rangle \langle N | \times [\boldsymbol{q} \times \boldsymbol{J}_{\mathrm{m}}(\boldsymbol{q})]_3 | N_0 II \rangle \delta(\omega - E_N + E_0) \right\}, (16)$$

$$S^{(1)}(\omega, |\mathbf{q}|) = \operatorname{Im}\left\{\int \frac{\mathrm{d}\hat{q}}{4\pi} \epsilon^{3jk} \sum_{N \neq N_0} \langle N_0 II | \mathbf{J}_{\mathbf{c},j}(-\mathbf{q}) | N \rangle \times \langle N | \mathbf{J}_{\mathrm{m},k}(\mathbf{q}) | N_0 II \rangle \delta(\omega - E_N + E_0) \right\}.$$
(17)

式中dq定义为动量q所对应立体角的积分变

量, *J*_c 与 *J*_m 分别为电流与磁流密度算符. |*N*₀*II*) 定 义自旋为 *I* 且 *z* 分量投影为 *I* 的原子核基态. (15) 式 中能量与动量积分权重函数 *h*^(0,1) 的表达式为^[29]

$$h^{(0)}(\omega, |\mathbf{q}|) = \left(2 + \frac{\omega}{E_{q}}\right) \frac{E_{q}^{2} + m_{l}^{2} + E_{q}\omega}{(E_{q} + \omega)^{2} - m_{l}^{2}} - \frac{2|\mathbf{q}| + \omega}{|\mathbf{q}| + \omega},$$
(18)

$$h^{(1)}(\omega, |\mathbf{q}|) = \frac{1}{E_{q}} \frac{E_{q}^{2} + m_{l}^{2} + E_{q}\omega}{(E_{q} + \omega)^{2} - m_{l}^{2}} - \frac{1}{|\mathbf{q}| + \omega}.$$
 (19)

当考虑弹性贡献时,原子核在中间态获得动量 q及反冲动能 $q^2/(2M)$.因此,TPE效应对HFS 的弹性修正为^[29]

$$E_{\rm el} = \frac{2\alpha E_{\rm F}}{\pi m_{\rm l}} \int_0^\infty \mathbf{d} \left| \boldsymbol{q} \right| \left\{ \left[h^{(0)} \left(\frac{\boldsymbol{q}^2}{2M}, \left| \boldsymbol{q} \right| \right) - \frac{\boldsymbol{q}^2}{2M} \right] \times h^{(1)} \left(\frac{\boldsymbol{q}^2}{2M}, \left| \boldsymbol{q} \right| \right) \right\} F_{\rm E}(\boldsymbol{q}^2) F_{\rm M}(\boldsymbol{q}^2) - \frac{4m_l m_{\rm r}}{\boldsymbol{q}^2} \right\},$$

$$(20)$$

其中 $F_{\rm M}$ 为原子核的磁形状因子. 当取 $M \gg m_{\rm l}$ 时, $E_{\rm el}(0)$ 可近似为与Zemach半径成正比 $E_{\rm Zem} = -2\alpha m_{\rm r} r_{\rm Z}$ ^[31,32]. (20)式中最后一项抵消了动量积分的红外发散,并避免与单光子交换的非微扰计算重复考虑^[33].

3 核结构第一性原理计算

在计算 TPE 核结构效应对原子光谱的修正 时,需要计算原子核的电磁形状因子以及核响应函 数的能量与动量积分,可使用核结构第一性原理方 法进行计算.核电磁形状因子是原子核基态的可 观测量,因此需要精确求解核基态波函数.如今, 量子多体理论与算力的发展为通过多体哈密顿量 求解轻核 ($A \leq 4$)基态性质提供了便利^[34,35].相比 之下,TPE 效应对原子能谱的非弹性贡献可通过 计算一系列核响应函数 $S_{\hat{O}}(\omega)$ 的广义求和规则 (generalized sum rule, GSR) *I*获得:

$$I = \int_{\omega_{\rm th}}^{\infty} \mathrm{d}\omega g(\omega) S_{\hat{O}}(\omega). \tag{21}$$

在计算核响应函数时,必须计算原子核完整的 激发谱,其中包括众多连续态.原子核第一性原 理计算方法通常基于具有局域性且平方可积的完 备基展开,可严格计算束缚态问题,但在求解散射 态时则存在收敛困难.洛仑兹积分变换 (Lorentz integral transform, LIT) 方法可绕开对连续谱的 直接计算,从而间接求解核响应函数^[36,37].然而, 在计算 TPE 中的求和规则时, LIT 仍存在计算效 率与精度的挑战.

对于²H的质子-中子两体问题,一方面可通过 谐振子基展开获得²H的基态信息与GSR.随着谐 振子基空间的扩大,数值计算结果逐步收敛,实现 高精度计算.另一方面,也可通过Lippmann-Schwinger (LS)方程严格求解²H基态 (束缚态)与激发 态 (散射态),从而实现对 TPE 的严格求解.

对于三体和四体问题,运用有效相互作用超球谐 基 (effective interaction hyperspherical harmonics, EIHH) 方法可高效计算原子核多体束缚态问题. 但在计算 GSR 时需要庞大的基空间,直接对角化 的方法通常很难实现数值收敛以达到高精度.因此,通过发展"Lanczos 求和规则"技术^[38],可实现 对 GSR 的高精度计算,并同时避免 LIT 直接求解 响应函数时的困难.当 (21) 式中能量权重函数 $g(\omega)$ 连续可导时, Lanczos 方法将完整的哈密顿量 空间投影至与电磁激发算符 \hat{O} 相关的 Krylov 子空 间,从而缩小基空间有效维度,并通过对子空间对 角化获得 GSR 的高精度计算结果. Lanczos 方法 的引入显著加速了计算的收敛过程,能够在较短时 间内获得核多体系统中 GSR 的高精度计算结果.

通过结合谐振子基函数、LS方程、EIHH方 法,能够准确求解原子核两体、三体和四体问题, 结合 Lanczos 求和规则方法,可以高效地计算响应 函数的广义求和规则,从而准确、高效地计算 TPE 核极化效应对一系列原子光谱的影响.这些数值方 法为深入理解核结构和核反应机制以及理解原子 能谱中的 TPE 效应提供了有力的帮助.

4 TPE 理论研究现状

结合手征核力与量子多体方法的第一性原理

计算, TPE 核结构效应对兰姆位移的修正已经在 一系列缪原子中得到系统研究. 在µ²H中, E_{TPE}在 手征有效场理论 (xEFT) 核力下的计算结果^[39,40] 与唯象核力模型 (Argonne V18, AV18)^[41,42]、零程 核力模型[43,44] 以及无π介子有效场理论[45-47] 的计 算结果高度一致,并且与通过对 e-D 散射数据进行 色散关系分析所提取出的 ETPE 预测结果^[48]相符. 在μ²H中, 通过手征有效场理论的幂次规则 (power counting) 估计手征核力在第三阶展开下 对 ETPE 理论预测的误差为 0.6%, 相比之下, 由于缺 乏高精度的散射数据,基于色散关系的 TPE 计算 误差为 20%. 结合 EIHH 量子多体方法与 Lanczos 求和规则算法, μ³H, μ^{3, 4}He+中 TPE 效应对兰姆 位移的修正也得到了计算^[49-51]. 通过比较 AV18+ UIX 唯象核力模型 [52,53] 与 χEFT [54,55] 手征核力对 ETPE 的计算结果,可以评估核结构理论的模型依 赖性对 ETPE 的影响,从而估算理论误差.表1列出 了上述缪原子中 ETPE 的理论预测结果和误差,并 分解为核结构弹性贡献、核极化贡献、单核子弹性 TPE 贡献与单核子极化贡献四部分. 通过比较分 析,核结构理论模型计算 TPE 效应的误差随质量 数 A 的增大而增加. 研究不仅验证了不同核力模 型在计算 ETPE 时的一致性,还深入分析了这些模 型的理论误差来源. 这为实验数据的精确分析和核 半径的准确提取提供了重要的理论支持.

CREMA 合作组在 2016 年测量了 μ^{2} H的兰 姆位移,从中提取出氘核的电荷半径为 r_{d} = 2.12562(78) fm^[8]. 其系统误差主要源于 E_{TPE} 理论 预测的不确定性. 该结果比 CODATA 标准值小 $6.0\sigma^{[4]}$,与 e^{2} H精密谱测量结果相差 $3.5\sigma^{[56]}$.并且 $\mu^{H} - \mu^{2}$ H兰姆位移测量核电荷半径同位素位移的 结果与相应的电子原子能谱测量值相差 $2.6\sigma^{[57]}$. CREMA 合作组又于 2021 年与 2023 年分别测量 了 μ^{4} He⁺与 μ^{3} He⁺的兰姆位移,并确定了 4 He 与 3 He

表 1 不同 μ 原子中 δ_{TPE} 的计算结果和理论误差 (单位 meV). 结果被分解为弹性部分和核极化部分, 以及单核子部分. 数据来源于文献 [51]

Table 1.	Theoretical	prediction	and	uncertainty of	of $\delta_{\rm TP}$	_E in	various	muonic	atoms	(in u	nit o	f meV	'). Tł	ne resu	lts ar	e decom
posed into	elastic, pola	rizability, a	and s	single-nucleon	parts	. Da	ta collec	ted from	n Ref. [51].						

	$\delta^N_{ m el}$	$\delta^N_{ m pol}$	$\delta^A_{ m el}$	$\delta^A_{ m pol}$	$\delta_{ ext{TPE}}$
$\mu^2 H$	-0.030(02)	-0.020(10)	-0.423(04)	-1.245(13)	-1.718(17)
$\mu^{3}H$	-0.033(02)	-0.031(17)	-0.227(06)	-0.480(11)	-0.771(22)
$\mu^{3}\text{He}^{+}$	-0.52(03)	-0.25(13)	-10.49(23)	-4.23(18)	-15.49(33)
$\mu^4 He^+$	-0.54(03)	-0.34(20)	-6.14(31)	-2.35(13)	-9.37(44)

的核电荷半径分别为 $r_{\alpha} = 1.67824(83)$ fm 与 $r_{h} = 1.97007(94)$ fm^[9,10]. 实验同时确定了^{3,4}He电荷半径的同位素位移,这一结果为电子原子精密谱测量该同位素位移时存在的争议^[58-63]提供了新的参考数据.

传统理论在对 HFS 中 TPE 效应的预测精度 上存在困难. 利用核力零程近似计算²H 1S HFS 中 的 TPE 效应^[64,65] 与 ν_{exp} (²H) – ν_{QED} (²H) = 45.2 kHz 在 5% 范围内一致^[13,25]. 该理论方法又被文献 [66] 扩展到估算 μ^{2} H 2S 态 HFS 中的 TPE 效应^[67,68]. 然而,核力零程近似在对氘核长程渐近行为的描述 上存在 33% 的偏差,并且理论中能量积分截断的 选取具有任意性,因而理论存在很大的不确定度, 与实验的符合存在偶然.

另一种传统理论方法则基于 Low-term 公式, 利用准完备性近似合并 TPE 中的弹性与非弹性贡 献,使 TPE 在该近似下仅依赖原子核基态的波函 数. 然而,当核激发的动量尺度与轻子质量相当时, 该近似改变了积分的低动量依赖. Low-term 公式 预测的²H 1S 态的 TPE 效应为 46 kHz^[26,69]. 然而,由 于计算中忽略了单核子 TPE 贡献的反冲与极化效 应,与 $\nu_{exp} - \nu_{QED}$ 的符合具有偶然性.考虑单核子贡 献修正后的 TPE 预测结果应该为 $E_{TPE,mod}(^{2}H) =$ 64 kHz,与 $\nu_{exp} - \nu_{QED}$ 相差 43%. Kalinowski等^[70] 通过引入高阶极化修正扩展了 Low-term 公式,并 用于计算 μ^{2} H 2S 态中的 TPE 效应,得到的计算结 果为 $E_{TPE}(\mu^{2}H) = 0.0383(86)$ meV,仅占 $\nu_{exp}(\mu^{2}H) - \nu_{OED}(\mu^{2}H) = 0.0966(73)$ meV 的 40%^[68].由于这一 计算引入了原子核激发能的幂次展开,可能过分强调了极化修正中的高能贡献,并导致与 Low-term 贡献的显著抵消,造成与实验结果的差异.

利用无 π 介子有效场理论核力, TPE 核结构 效应对e²H与µ²H中 HFS 的修正, 分解为核结构 弹性贡献与核极化贡献. 单核子 TPE 效应的贡献 可通过将质子与中子的 TPE 效应 [71-74] 经由原子 波函数的比例关系转化为对 e²H 与 u²H 中的贡献. 表 2 总结了²H 和µ²H 中的弹性、核极化和单核子 TPE 效应及其理论误差,并与测量值和其他理论 预测进行了比较.理论误差主要来源于无π介子有 效场理论在次次领头阶截断的高阶修正误差[29]、 核子电磁形状因子参数误差[75-78]、色散关系分析 提取单核子 TPE 效应的理论误差、以及高阶三光 子交换效应修正误差(*Δ*3γ)^[70]. 这项最新研究中, 计算的²H 1S HFS 中的 TPE 贡献为 41.7(4.4) kHz. 这和 HFS 的实验测量值与 QED 理论预测值之间 的差异 $\nu_{exp} - \nu_{OED}$ 在 1 σ 内符合. 预测的 μ^2 H 2S HFS 中的 TPE 贡献为 0.117(13) meV, 超出实验-QED 差异 17%, 但在 1.3σ 范围内符合.

5 结 论

本文系统回顾并深入探讨了 TPE 效应对轻质 量电子原子及缪原子兰姆位移和 HFS 修正的理论 框架及研究进展.探讨了利用核子-核子间相互作 用模型,并结合 LS 方程、EIHH 量子多体方法和 Lanczos 求和规则算法,对 TPE 效应在一系列原

表 2 单质子、单中子、核弹性和核极化 TPE 效应对²H 与μ²H 中 HFS 的修正.数据来源于文献 [29] Table 2. The single-proton, single-neutron, nuclear elastic, and nuclear-polarizability TPE contributions to HFS in ²H and μ²H. Data from Ref. [29].

	$^{2}\mathrm{H}~(1\mathrm{S})/\mathrm{kHz}$	$\mu^2 H~(1S)/meV$	$\mu^2 \mathrm{H}~(2\mathrm{S})/\mathrm{meV}$
E_{el}	-42.1(2.1)	-0.984(46)	-0.123(6)
E_{pol}	109.8(4.5)	2.86(12)	0.358(14)
$E_{\rm nucl} = E_{\rm el} + E_{\rm pol}$	67.7(4.2)	1.878(88)	0.235(11)
$E_{1p}^{[71]}$	-35.54(8)	-1.018(2)	-0.1272(2)
$E_{1n}^{[72]}$	9.6(1.0)	0.079(32)	0.010(4)
$arDelta_{3\gamma}$	± 0.49	± 0.052	± 0.0065
E_{TPE}	41.7(4.4)	0.94(11)	0.117(13)
Ref. [64,65]	43		
Ref. [26,69] mod	64.5		
Ref. [70]		0.304(68)	0.0383(86)
$ u_{\mathrm{exp}} - u_{\mathrm{QED}}{}^{[25,68]}$	45.2		0.0966(73)

注: "mod"对原文献修正核子反冲与极化效应; TPE效应在µ2H的1S和2S态中相差8倍.

子光谱中的贡献的第一性原理研究.通过对不同核 力模型的比较分析和误差来源的系统评估,有效地 分析核理论误差对 TPE 效应的影响,从而提供高 精度且可靠的理论预测结果.

研究表明, 深入理解 TPE 效应对于提高原子 光谱实验对核电荷半径及 Zemach 半径等核结构 信息的测量精度至关重要.为了进一步提升 TPE 效应的理论精度,未来的研究需要发展更精确的核 力理论,提升量子多体计算的效率和精度,并扩展 核理论计算对 TPE 效应研究的应用范围.通过与 高精度原子光谱实验的进一步结合,这些努力将有 助于深化对核结构和核子-核子相互作用的理解, 检验高阶 QED 理论,为解决质子半径难题及相关 核半径测量问题提供新的见解.

参考文献

- Mohr P J, Taylor B N, Newell D B 2012 Rev. Mod. Phys. 84 1527
- [2] Pohl R, Antognini A, Nez F, et al. 2010 Nature 466 213
- [3] Antognini A, Nez F, Schuhmann K, et al. 2013 Science 339 417
- [4] Mohr P J, Newell D B, Taylor B N 2016 Rev. Mod. Phys. 88 035009
- [5] Xiong W, Gasparian A, Gao H, et al. 2019 Nature 575 147
- [6] Bernauer J C, Achenbach P, Ayerbe Gayoso C, et al. 2010 Phys. Rev. Lett. 105 242001
- [7] Gilman R, Downie E J, Ron G, et al. 2017 arXiv:1709.09753 [physics.ins-det]
- [8] Pohl R, Nez F, Fernandes L M P, et al. 2016 Science 353 669
- [9] Krauth J J, Schuhmann K, Ahmed M A, et al. 2021 Nature 589 527
- [10] Schuhmann K, Fernandes L M P, Nez F, et al. 2023 arXiv:2305. 1 1679 [physics. atom-ph]
- [11] Borie E 2012 Annals of Physics 327 733
- [12] Hellwig H, Vessot R F C, Levine M W, Zitzewitz P W, Allan D W, Glaze D J 1970 *IEEE Trans. Inst. Meas.* **19** 200
- [13]~ Wineland D J, Ramsey N F 1972 Phys. Rev. A 5 821
- [14]~ Rosner S D, Pipkin F M 1970 $Phys.\ Rev.\ A$ 1 571
- [15] Kowalski J, Neumann R, Noehte S, Scheffzek K, Suhr H, Putlitz G z 1983 Hyp. Int. 15 159
- [16] Guan H, Chen S, Qi X Q, et al. 2020 Phys. Rev. A 102 030801
- [17] Sun W, Zhang P P, Zhou P, et al. 2023 Phys. Rev. Lett. 131 103002
- [18] Sato M, Ishida K, Iwasaki M, et al. 2014 20th International Conference on Particles and Nuclei (Hamburg, Germany), August 24, 2014 pp460–463
- [19] Pizzolotto C, Adamczak A, Bakalov D, et al. 2020 Eur. Phys. J. A 56 185
- [20] Amaro P, Adamczak A, Ahmed M A, et al. 2022 SciPost Phys. 13 020
- [21] Ohayon B, Abeln A, Bara S, et al. 2024 MDPI Phys. 6 206
- [22] Strasser P, Fukumura S, Ino T, et al. 2023 J. Phys.: Conf. Ser. 2462 012023

- [23] Schwartz C 1955 Phys. Rev. 97 380
- [24] Woodgate G K 1983 Elementary Atomic Structure. (2nd Ed.) (London, England: Oxford University Press) pp168–174
- [25] Eides M I, Grotch H, Shelyuto V A 2001 Phys. Rep. 342 63
- [26] Friar J L, Payne G L 2005 *Phys. Rev. C* 72 014002
- [27] Rosenfelder R 1983 Nucl. Phys. A 393 301
- [28]Leidemann W, Rosenfelder R 1995 Phys. Rev. C 51 427
- [29]~ Ji C, Zhang X, Platter L 2024 Phys. Rev. Lett. $\mathbf{133}~042502$
- [30] Friar J, Rosen M 1974 Annals of Physics 87 289
- [31] Zemach A C 1956 Phys. Rev. 104 1771
- [32] Friar J, Sick I 2004 Phys. Lett. B 579 285
- [33] Carlson C E, Nazaryan V, Griffioen K 2011 Phys. Rev. A 83 042509
- [34] Kamada H, Nogga A, Glöckle W, et al. 2001 Phys. Rev. C 64 044001
- [35] Leidemann W, Orlandini G 2013 Prog. Part. Nucl. Phys. 68 158
- [36] Efros V D, Leidemann W, Orlandini G 1994 Phys. Lett. B 338 130
- [37] Efros V D, Leidemann W, Orlandini G, Barnea N 2007 J. Phys. G 34 R459
- [38] Nevo Dinur N, Barnea N, Ji C, Bacca S 2014 Phys. Rev. C 89 064317
- [39] Hernandez J O, Ji C, Bacca S, Nevo Dinur N, Barnea N 2014 Phys. Lett. B 736 344
- [40] Hernandez O, Ekström A, Dinur N N, Ji C, Bacca S, Barnea N 2018 Phys. Lett. B 778 377
- [41] Pachucki K 2011 Phys. Rev. Lett. 106 193007
- [42] Pachucki K, Wienczek A 2015 Phys. Rev. A 91 040503
- [43] Hernandez O J, Ji C, Bacca S, Barnea N 2019 Phys. Rev. C 100 064315
- [44] Friar J L 2013 Phys. Rev. C 88 034003
- [45] Emmons S B, Ji C, Platter L 2021 J. Phys. G 48 035101
- [46] Lensky V, Hagelstein F, Pascalutsa V 2022 Eur. Phys. J. A 58 224
- [47] Lensky V, Hagelstein F, Pascalutsa V 2022 Phys. Lett. B 835 137500
- [48] Carlson C E, Gorchtein M, Vanderhaeghen M 2014 Phys. Rev. A 89 022504
- [49] Nevo Dinur N, Ji C, Bacca S, Barnea N 2016 Phys. Lett. B 755 380
- [50] Ji C, Nevo Dinur N, Bacca S, Barnea N 2013 Phys. Rev. Lett. 111 143402
- [51] Ji C, Bacca S, Barnea N, Hernandez O J, Nevo-Dinur N 2018 *J. Phys. G* 45 093002
- [52] Wiringa R B, Stoks V G J, Schiavilla R 1995 Phys. Rev. C 51 $_{\mbox{38}}$
- [53] Pudliner B S, Pandharipande V R, Carlson J, Wiringa R B 1995 Phys. Rev. Lett. 74 4396
- [54] Entem D R, Machleidt R 2003 Phys. Rev. C 68 041001
- [55] Navrátil P 2007 Few-Body Syst. 41 117
- [56] Pohl R, Nez F, Udem T, et al. 2017 Metrologia 54 L1
- [57] Parthey C G, Matveev A, Alnis J, Pohl R, Udem T, Jentschura U D, Kolachevsky N, Hänsch T W 2010 Phys. Rev. Lett. 104 233001
- [58] Shiner D, Dixson R, Vedantham V 1995 Phys. Rev. Lett. 74 3553
- [59] van Rooij R, Borbely J S, Simonet J, Hoogerland M D, Eikema K S E, Rozendaal R A, Vassen W 2011 Science 333 196
- [60] Cancio Pastor P, Consolino L, Giusfredi G, De Natale P, Inguscio M, Yerokhin V A, Pachucki K 2012 Phys. Rev. Lett. 108 143001

- [61] Zheng X, Sun Y R, Chen J J, Jiang W, Pachucki K, Hu S M 2017 Phys. Rev. Lett. 119 263002
- [62] Rengelink R J, Werf Y, Notermans R P M J W, Jannin R, Eikema K S E, Hoogerland M D, Vassen W 2018 Nature Phys. 14 1132
- [63] Huang Y J, Guan Y C, Peng J L, Shy J T, Wang L B 2020 *Phys. Rev. A* 101 062507
- [64] Khriplovich I B, Milshtein A I, Petrosian S S 1996 Phys. Lett. B 366 13
- [65] Khriplovich I B, Milstein A I 2004 J. Exp. Theor. Phys. 98 181
- [66] Faustov R N, Martynenko A P 2003 Phys. Rev. A 67 052506
- [67] Faustov R N, Martynenko A P, Martynenko G A, Sorokin V V 2014 Phys. Rev. A 90 012520
- [68] Krauth J J, Diepold M, Franke B, Antognini A, Kottmann F, Pohl R 2016 Ann. Phys. 366 168

- [69] Friar J L, Payne G L 2005 Phys. Lett. B 618 68
- [70] Kalinowski M, Pachucki K, Yerokhin V A 2018 *Phys. Rev. A* 98 062513
- [71] Antognini A, Hagelstein F, Pascalutsa V 2022 Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 72 389
- [72] Tomalak O 2019 Eur. Phys. J A 55 64
- [73] Antognini A, Lin Y H, Meißner U G 2022 Phys. Lett. B 835 137575
- [74] Tomalak O 2019 Phys. Rev. D 99 056018
- [75] Lin Y H, Hammer H W, Meißner U G 2021 Phys. Lett. B 816 136254
- [76] Lin Y H, Hammer H W, Meißner U G 2021 Eur. Phys. J. A 57 255
- [77] Lin Y H, Hammer H W, Meißner U G 2022 Phys. Rev. Lett. 128 052002
- [78] Kelly J J 2004 Phys. Rev. C 70 068202

SPECIAL TOPIC—Precision spectroscopy of few-electron atoms and molecules

Nuclear structure effects to atomic Lamb shift and hyperfine splitting^{*}

Ji Chen^{1)2)†}

(Key Laboratory of Quark and Lepton Physics, Institute of Particle Physics, Central China Normal University, Wuhan 430079, China)
 (Southern Center for Nuclear-Science Theory, Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Sciences, Huizhou 516000, China)
 (Received 31 July 2024; revised manuscript received 8 September 2024)

Abstract

The development of precision atomic spectroscopy experiments and theoretical advancements plays a crucial role in measuring fundamental physical constants and testing quantum electrodynamics (QED) theories. It also provides a significant platform for studying the internal structure of atomic nuclei and developing high-precision nuclear structure theories. Nuclear structure effects such as charge distribution, magnetic moment distribution, and nuclear polarizability have been accurately determined in many atomic spectroscopy experiments, significantly enhancing the precision of nuclear structure detection.

This paper systematically reviews the theoretical research and developments on the corrections of twophoton exchange (TPE) effects on the Lamb shift and hyperfine structure (HFS) in light ordinary and muonic atoms. Advanced nuclear force models and ab initio methods are employed to analyze the TPE nuclear structure corrections to the Lamb shift in a series of light muonic atoms. The paper compares the calculation of TPE effects from various nuclear models and evaluates the model dependencies and theoretical uncertainties of TPE effect predictions.

Furthermore, the paper discusses the significant impact of TPE theory on explaining the discrepancies between experimental measurements and QED theoretical predictions in atomic hyperfine structures, resolving the accuracy difficulties in traditional theories. Detailed analyses of TPE effects on HFS in electronic and muonic deuterium using pionless effective field theory show good agreement with experimental measurements, validating the accuracy of theoretical predictions.

The theoretical studies of TPE effects in light atoms are instrumental for determining nuclear charge radii and Zemach radii from spectroscopy measurements. These results not only enhance the understanding of nuclear structure and nuclear interactions but also offer crucial theoretical guidance for future experiments, thereby advancing the understanding of the proton radius puzzle and related studies.

Keywords: two-photon exchange, nuclear ab initio method, Lamb shift, hyperfine splitting

PACS: 21.45.-v, 21.60.De, 25.20.-x, 36.10.Ee

DOI: 10.7498/aps.73.20241063

CSTR: 32037.14.aps.73.20241063

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12175083, 12335002, 11805078).

[†] E-mail: jichen@ccnu.edu.cn

物理学报Acta Physica Sinica





Institute of Physics, CAS

原子兰姆位移与超精细结构中的核结构效应

计晨

Nuclear structure effects to atomic Lamb shift and hyperfine splitting Ji Chen

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 73, 202101 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20241063 在线阅读 View online: https://doi.org/10.7498/aps.73.20241063 当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

磁场中HD分子振转跃迁的超精细结构

Hyperfine structure of ro-vibrational transition of HD in magnetic field 物理学报. 2021, 70(17): 170301 https://doi.org/10.7498/aps.70.20210512

氢分子离子超精细结构理论的综述

Review of the hyperfine structure theory of hydrogen molecular ions 物理学报. 2024, 73(20): 203104 https://doi.org/10.7498/aps.73.20241101

类铝离子钟跃迁能级的超精细结构常数和朗德g因子

Hyperfine interaction constants and Land é g factors of clock states of Al-like ions 物理学报. 2023, 72(22): 223101 https://doi.org/10.7498/aps.72.20230940

三元Hf-C-N体系的空位有序结构及其力学性质和电子性质的第一性原理研究

First-principles study of vacancy ordered structures, mechanical properties and electronic properties of ternary Hf-C-N system 物理学报. 2021, 70(21): 216101 https://doi.org/10.7498/aps.70.20210244

高电荷态类硼离子²P_{3/2}—²P_{1/2}跃迁的实验和理论研究进展 Experimental and theoretical research progress of ²P_{1/2} ²P_{3/2} transitions of highly charged boron-like ions 物理学报. 2024, 73(20): 203102 https://doi.org/10.7498/aps.73.20241190

BrF分子电磁偶极跃迁转动超精细微波谱模拟

Simulation of hyperfine-rotational spectrum of electromagnetic dipole transition rotation of BrF molecules 物理学报. 2023, 72(4): 043301 https://doi.org/10.7498/aps.72.20221957