

О.Ю.Хецелиус*Одесский государственный экологический университет***МЕТОД КЭД ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ С УЧЕТОМ ЯДЕРНЫХ ЭФФЕКТОВ И СВЕРХТОНКАЯ СТРУКТУРА СПЕКТРОВ СВЕРХТЯЖЕЛЫХ СИСТЕМ**

Развивается новый подход к оценки сверхтонкой структуры тяжелых и сверхтяжелых конечных ферми-систем. базирующийся на формализме КЭД теории возмущений (ТВ) с использованием в нулевом приближении калибровочно-инвариантных базисов релятивистских биспиноров.

Ключевые слова: *КЭД теория возмущений, сверхтонкая структура тяжелых систем*

Введение. Фундаментальной, наиболее актуальной проблемой современной теории тяжелых и сверхтяжелых ферми-систем и квантовой теории поля остается разработка нового неэмпирического высокоточного метода (или существенное усовершенствование существующих) расчета спектров собственных энергий, характеристик различных каналов распада, параметров сверхтонкой структуры и т.д. с обязательным прецизионным одновременным учетом релятивистских, корреляционных, радиационных и ядерных эффектов [1-14]. Важнейшим фактором является интерференция меж электронных корреляционных и ядерных эффектов и, конечно же развитие адекватной вычислительной процедуры расчета собственно энергетического сдвига для протяженного ядра, по возможности избегающей разложений по физическим параметрам $1/Z$, αZ , ZR/α [1]. В спектроскопии тяжелых атомных систем насущной проблемой является получение надежных данных о спектрах и спектроскопических характеристиках высоко зарядных членов изоэлектронных последовательностей многоэлектронных атомов, являющихся существенно релятивистскими системами [3-6]. В данной работе рассматривается новый подход [11-14] к оценке сверхтонкой структуры тяжелых и сверхтяжелых конечных ферми-систем. базирующийся на формализме КЭД теории возмущений (ТВ) с использованием в нулевом приближении калибровочно-инвариантных базисов дираковских биспиноров с одновременным корректным учетом в рамках достаточно экономных и эффективных вычислительных процедур корреляционных, ядерных (поправка на конечный размер ядра) и радиационных (собственно-энергетический вклад и вклад за счет поляризации вакуума в лэмбовский сдвиг) [6-11]. Релятивистские одноэлектронные эффекты учтены фактически в рамках приближения ДФ, причем в отличие от классического метода ДФ, используемый в расчетах базис релятивистских орбиталей генерируется с учетом условия калибровочной инвариантности. Для генерации искомого базиса использован фундаментальный принцип минимизации энергетического функционала, представляющего собой вклад поляризационных диаграмм 4-порядка КЭД [7], т.е. вклад диаграмм, связанный с обменом продольными фотонами в мнимую часть энергии системы. В нулевом приближении ТВ, таким образом, генерируется оптимизированный базис релятивистских дираковских биспиноров. Оператор возмущения ТВ учитывает эффект запаздывания кулоновского взаимодействия. Магнитное меж электронное взаимодействие учтено в низшем порядке по параметру α^2 (α - постоянная тонкой структуры). Ядерные эффекты, в частности. поправка на конечный размер ядра (распределение заряда в ядре моделировалось в гауссовом приближении), учтены в нулевом приближении ТВ в

соответствующих электрическом и поляризованном потенциалах. Нерелятивистский эффект конечности массы ядра учитывается элементарно, и мы не обсуждаем его здесь. Эффект релятивистской отдачи ядра мал и в современных расчетах маскируется по крайней мере неточностями в определении радиационных сдвигов [1-6]. В случае оценки поправок на лэмбовский сдвиг, в частности, для учета собственно энергетической части сдвига Лэмба реализована эффективная процедура Иванова и сотр. [4,6], основанная на использовании «точного» расчета Мора для H-подобных ионов с точечным ядром [1]. Метод Мора основывается на результатах ковариантной регуляризации S-матрицы Фейнмана. Иллюстрацией применения метода к расчету параметров сверхтонкой структуры являются полученные нами данные по Li-подобным тяжелым ионам.

Метод расчета: КЭД теория возмущений. Как обычно [6,7,11], определяем гамильтониан, и задача расчета спектров сводится к нахождению собственных функций и энергий этого гамильтониана. В КЭД -теории базовым элементом является не гамильтониан, а электродинамическая матрица рассеяния. В результате, имеется возможность сохранить традиционную структуру расчета атомных характеристик, сохраняя строгость КЭД теории. Эта возможность связана с введением затравочного потенциала системы по аналогии с методом квазипотенциала [6]. В КЭД ТВ в отдельных порядках, как известно, возникают специфические КЭД расходимости [1,4]. Разработаны процедуры компенсации расходимостей (процедура перенормировки) и в перенормированной теории вкладом "расходящихся" диаграмм в низших порядках сопоставляются конечные радиационные поправки и поправки на поляризацию вакуума. Исходим из того, что многоэлектронная атомная система описывается уравнением Дирака с релятивистским гамильтонианом (атомные ед.):

$$H = \sum_i h(r_i) + \sum_{i>j} V(r_i, r_j) \quad (1)$$

Здесь $h(r)$ – гамильтониан Дирака для электрона в поле ядра конечного размера; $1/r_{ij}$ – кулоновская часть межэлектронного взаимодействия; релятивистский потенциал межчастичного взаимодействия:

$$V(r_i r_j) = \exp(i\omega_{ij} r_{ij}) \cdot \frac{(1 - \alpha_i \alpha_j)}{r_{ij}} \quad (2)$$

Последовательный релятивистский вариант расчета сдвигов уровней, основанный на адиабатической формуле Гелл-Мана и Лоу с электродинамической матрицей рассеяния рассмотрен в [4-7,11]. Адиабатический формализм Гелл-Мана и Лоу приводят к рядам ТВ по константе связи для сдвигов ΔE , которые стандартно диаграмматизируются. Новые приближения в теории многочастичных систем удобно формулировать как методы суммирования диаграмм определенного типа. Уравнение (1), (2) полностью учитывает все одноэлектронные релятивистские поправки (кроме сдвига Лэмба), а двухэлектронные – с точностью до членов $\approx (\alpha Z)^2$. Принципиальная новизна нашего подхода по сравнению с альтернативными классическими методами [1-6] заключается в использовании *ab initio* принципа выбора нулевого приближения в рамках калибровочно-инвариантной схемы [7] и использовании регулярных процедур одновременного, эффективного учета ядерных, корреляционных и радиационных (поляризация вакуума электрон-позитронного поля) [11-14]. Будем считать, что электрон движется в сферически симметричном электрическом поле, т.е. пренебрегаем вкладами мультипольных электрических и магнитных составляющих реального поля ядра в радиационные поправки. В таком приближении состояние электрона определяется значениями главного квантового числа, полным моментом и четностью.

Волновые функции таких состояний факторизуются с выделением угловой и радиальной части. Соответствующие биспиноры можно представить таким образом:

$$\Psi_{jlm}(r) = \begin{pmatrix} \varphi_{jlm}(r) \\ \chi_{jlm}(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F(r)\Omega_{jlm}(r) \\ G(r)\Omega_{jlm}(r) \end{pmatrix} \quad (3)$$

где $\Omega_{jlm}(r)$ - шаровой спинор, $l=j\pm 1/2, l'=2j-l$, $F(r)$ и $G(r)$ - радиальные функции Дирака, которые удовлетворяют системе обыкновенных дифференциальных уравнений (здесь положено $\alpha=1$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial r} + (1 + \chi)\frac{F}{r} - (\varepsilon + m - V)G &= 0 \\ \frac{\partial G}{\partial r} + (1 - \chi)\frac{G}{r} + (\varepsilon - m - V)F &= 0 \end{aligned} \quad (4)$$

где F и G - большая и малая компоненты, $V(r)$ - потенциал ядра (в дальнейшем будет учтен конечный размер ядра), χ - квантовое число Дирака; Вид радиальных функций Дирака, естественно, зависит от вида потенциала $V(r)$. Мы считаем, что $V(r)$ регулярен при $r \rightarrow 0$; а при $r \rightarrow \infty$ переходит в кулоновский потенциал). При больших значениях χ радиальные функции F и G быстро изменяются в начале координат:

$$\begin{aligned} F(r), G(r) &\approx r^{\gamma-1} \\ \gamma &= \sqrt{\chi^2 - \alpha^2 z^2} \end{aligned} \quad (5)$$

Это создает известные трудности при численном интегрировании уравнений в области $r \rightarrow 0$. Удобно в обоих решениях выделить главную степенную зависимость при малых значениях аргумента. Это достигается следующей заменой: $f = Fr^{1-|\chi|}$, $g = Gr^{1-|\chi|}$. Дираковские уравнения для компонент F и G преобразуются следующим образом:

$$f' = -(\chi + |\chi|)f/r - \alpha ZVg - (\alpha ZE_{n\chi} + 2/\alpha Z)g \quad (6)$$

$$g' = (\chi - |\chi|)g/r - \alpha ZVf + \alpha ZE_{n\chi}f$$

где $E_{n\chi}$ - одноэлектронная энергия (без учета энергии покоя). В (7), как обычно, мы используем кулоновские единицы (С.у.). Система (7) имеет два стандартных типа фундаментальных решений (регулярное при $r \rightarrow 0$ и сингулярное при $r \rightarrow 0$). Уравнения системы (7) решались в дальнейшем численно методом Рунге-Кутты. Начальная точка интегрирования: $r_0=R/10^6$, где R - радиус ядра, конечное значение интервала интегрирования: $r_k \approx 30n^*$. Для учета эффектов на конечность ядра мы моделируем распределение заряда в ядре гауссовой функцией с учетом нормировки функции распределения на единицу [11]:

$$\rho(r|R) = \left(4\gamma^{3/2} / \sqrt{\pi}\right) \exp(-\gamma r^2) \quad (7)$$

$$\int_0^\infty dr r^2 \rho(r|R) = 1; \quad \int_0^\infty dr r^3 \rho(r|R) = R \quad (8)$$

где $\gamma = 4\pi/R^2$, R – эффективный радиус ядра, для которого принята стандартная Z -зависимость: $R = 1,202 \cdot 10^{-13} Z^{1/3}$ см. Приведем формулы для потенциалов конечного ядра и их производных по R . Пусть точечное ядро обладает некоторым центральным потенциалом $W(R)$. Переход к потенциалу конечного ядра осуществляется заменой $W(r)$ на

$$W(r|R) = W(r) \int_0^r dr r^2 \rho(r|R) + \int_r^\infty dr r^2 W(r) \rho(r|R). \quad (9)$$

Например, для кулоновского потенциала ядра со сферически симметричной плотностью $\rho(r|R)$ можно записать:

$$V_{nucl}(r|R) = -\left(\frac{1}{r}\right) \int_0^r dr r'^2 \rho(r'|R) + \int_r^\infty dr r' \rho(r'|R) \quad (10)$$

Искомый потенциал вычисляется из следующей системы уравнений:

$$V'_{nucl}(r, R) = \left(\frac{1}{r^2}\right) \int_0^r dr r'^2 \rho(r', R) \equiv \left(\frac{1}{r^2}\right) y(r, R) \quad (11)$$

$$y'(r, R) = r^2 \rho(r, R) \quad (12)$$

$$\rho'(r, R) = -8\gamma^{5/2} r / \sqrt{\pi} \exp(-\gamma r^2) = -2\gamma \rho(r, R) = -\frac{8r}{\pi r^2} \rho(r, R)$$

с граничными условиями: $V_{nucl}(0, R) = -4/(\pi r)$,

$$y(0, R) = 0 \quad (13)$$

$$\rho(0, R) = 4\gamma^{3/2} / \sqrt{\pi} = 32/R^3$$

Система уравнений (12) включает также уравнения для функции распределения плотности. Частная производная потенциала по радиусу ядра

$$\begin{aligned} \partial W(r|R) / \partial r &= W(r) \int_0^r dr r^2 \partial \rho(r|R) / \partial R + \int_0^\infty dr r^2 W(r) \partial \rho(r|R) / \partial r, \\ \partial \rho(r|R) / \partial R &= \rho(r|R) (2\gamma^2 - 3) / R. \end{aligned} \quad (14)$$

Производная по радиусу ядра физических характеристик, соответствующих потенциалу $W(r|R)$, представляется матричным элементом

$$\partial W(R) / \partial R = \int_0^\infty dr r^2 \left[F_{nlj}^2(r) + G_{nlj}^2(r) \right] \partial W(r|R) / \partial R, \quad (15)$$

где F, G – радиальные компоненты функций состояния внешнего электрона. Отметим, что конечность ядра нельзя учесть по теории возмущений как матричный элемент от разности двух потенциалов, поскольку функции состояний для двух потенциалов ядра качественно различаются в существенной области. Несмотря на качественное различие электронных орбиталей вблизи ядра, сама по себе энергетическая поправка на размер ядра мала по сравнению с полной энергией связи (за исключением случая сверхтяжелых ядер). Вычисление потенциалов, производных от них, матричных элементов сведено к решению одной системы обыкновенных дифференциальных уравнений, т.е. к одномерной процедуре. Например, для вычисления потенциала $W(r|R)$ и $\partial W(r|R) / \partial R$ решается система уравнений:

$$dW(r|R) / dr = P(r|R) dW(r) / dr, \quad (16)$$

$$dP(r|R) = r^2 \rho(r|R),$$

$$d[\partial W(r|R)/\partial R]/dr = S(r|R) dW(r)/dr,$$

$$dS(r|R)/dr = r^2 [\partial \rho(r|R)/\partial R]$$

с известными аналитическими функциями $W(r)$, $\rho(r|R)$. Граничные значения при $r \rightarrow 0$ для искомых функций находятся разложением $W(r)$, $\rho(r|R)$ в ряд по r . Энергии квадрупольного (W_q) и магнитного дипольного (W_μ) взаимодействий определяются стандартно [11,14]:

$$W_q = [\Delta + C(C+1)]B, \quad W_\mu = 0,5 AC,$$

$$\Delta = -(4/3)(4\chi-1)(I+1)/[i(I-1)(2I-1)], \quad C = F(F+1) - J(J+1) - I(I+1). \quad (17)$$

Здесь I – спин ядра, F – полный момент системы, J – полный электронный момент. Константы сверхтонкого расщепления определяются следующими радиальными интегралами:

$$A = \{[(4,32587)10^{-4}Z^2 \chi g_l]/(4\chi^2-1)\} (RA)_{-2}, \quad (18)$$

$$B = \{7,2878 \cdot 10^{-7} Z^3 Q / [(4\chi^2-1)I(I-1)]\} (RA)_{-3},$$

где g_l – фактор Ланде, Q – квадрупольный момент ядра (в Варт); Радиальные интегралы записываются как:

$$(RA)_{-2} = \int_0^\infty dr r^2 F(r)G(r)U(1/r^2, R),$$

$$(RA)_{-3} = \int_0^\infty dr r^2 [F^2(r) + G^2(r)U(1/r^2, R)], \quad (19)$$

Радиальные части F и G двух компонент дираковской волновой функции для электрона в поле (10) определяются решением системы (7).

Результаты расчета и выводы. В табл.1, 2 приведены данные нашего расчета констант сверхтонкой расщепления для нижних возбужденных состояний различных Li-подобных ионов. В табл. 1 проведено сравнение наших данных и данных работ Иванова с сотр. и Тржасковской с сотр. [4,15] для константы, описывающей дипольное магнитное расщепление основного термина конфигурации $1s^2 2s$ для ряда ионов. Основное различие между приведенными данными определяется рядом факторов, в частности, использованием различных моделей распределения магнитного момента ядра (а именно, использование моделей объемного и поверхностного распределения), качеством базисов релятивистских дираковских орбиталей, отличной методикой учета конечного размера ядра. Систематическая разница между данными, помимо остальных факторов, связана также с неопределенностью в определении размера ядра. Известно [11], что вариации размера ядра в разумных пределах могут приводить к изменению константы A более, чем на три порядка. Этот вопрос, до сих пор не имеющий адекватного разрешения, будет рассмотрен в отдельной работе. Основываясь на данных аналогичных расчетов для тяжелых и сверхтяжелых водородоподобных систем [11], где полученные на основе изложенного метода данные оказываются в наилучшем согласии с имеющимися экспериментальными результатами по сравнению с данными, полученными на основе классических подходов типа методов Дирака-Фока, Дирака-Кона-Шэма, многочастичной теории возмущений Меллера-Плессета и др., можно заключить, что полученные нами результаты следует считать наиболее точными.

Таблица 1-Данные для константы \bar{A} : а,б - объемное (соответственно наст. работа и [4]);
в - поверхностное распределение [15]

Z	а	б	в
25	988 -03	1002 -02	9872 -03
28	1031 -02	1034 -02	1020 -02
34	1094 -02	1099 -02	1087 -02
37	1131 -02	1135 -02	1123 -02
43	1210 -02	1214 -02	1203 -02
53	1379 -02	1381 -02	1370 -02

Таблица 2-Константы сверхтонкого взаимодействия: $A=Z^3 g_l \bar{A} \text{ см}^{-1}$, $B=\frac{Z^3 Q}{I(2I-1)} \bar{B}$
 см^{-1}

для Li-подобных ионов (настоящая работа)

nlj	Z	20	69	79	92
2s	\bar{A}	93 -03	176 -02	215 -02	314 -02
3s	\bar{A}	26 -03	51 -03	63 -03	90 -03
4s	\bar{A}	15 -03	19 -03	24 -03	36 -03
2p _{1/2}	\bar{A}	25 -03	56 -03	71 -03	105 -02
3p _{1/2}	\bar{A}	81 -04	16 -03	20 -03	31 -03
4p _{1/2}	\bar{A}	32 -04	72 -04	91 -04	11 -03
2p _{3/2}	\bar{A}	50 -04	67 -04	71 -04	72 -04
	\bar{B}	9 -04	13 -04	15 -04	17 -04
3p _{3/2}	\bar{A}	13 -04	19 -04	21 -04	22 -04
	\bar{B}	31 -05	51 -05	55 -05	62 -05
4p _{3/2}	\bar{A}	62 -05	89 -05	92 -05	8 -04
	\bar{B}	10 -05	20 -05	22 -05	26 -05
3d _{3/2}	\bar{A}	88 -05	10 -04	11 -04	12 -04
	\bar{B}	51 -06	9 -05	10 -05	11 -05
4d _{3/2}	\bar{A}	35 -05	51 -05	55 -05	58 -05
	\bar{B}	12 -06	44 -06	50 -06	56 -06
4d _{5/2}	\bar{A}	15 -05	19 -05	20 -05	21 -05
	\bar{B}	59 -07	15 -06	16 -06	17 -06

Список литературы

1. *Mohr P.J.* Energy Levels of H-like atoms predicted by Quantum Electrodynamics, $10 < Z < 40$ // *Atom. Data Nucl. Data Tabl.*-2003.-Vol.24,N2.-P.453-470.
2. *Blundell S.A.* Ab initio Calculations of QED Effects in Li-like, Na-like and Cu-like Ions// *Phys. Scripta.*-1993.-Vol.46,N1.-P.144-150.
3. *Gould H.* . Lamb shift measurement in lithiumlike uranium (U^{89+})//*Phys. Scripta T.*-1999.-Vol.52.-P.61-64.
4. *Ivanova E.P., Ivanov L.N.* Modern Trends in Spectroscopy of Multicharged Ions// *Physics Rep.*-1991.-Vol.166,N6.-P.315-390.
5. *Ivanov L.N., Ivanova E.P., Knight L.* Energy Approach to consistent QED theory for calculation of electron-collision strengths//*Phys. Rev. A.*-1993.-Vol.48,N6.-P.4365-74.
6. *Ivanova E.P., Ivanov L.N., Glushkov A.V., Kramida A.E.* High order corrections in the Relativistic Perturbation Theory with the model Zeroth Approximation, Mg-like and Ne-like ions //*Phys. Scripta* –1985.-Vol.32,N4.-P.512-524.
7. *Glushkov A.V., Ivanov L.N.* Radiation decay of atomic states: atomic residue and gauge noninvariant contributions//*Phys. Lett. A.*-1992.-V.170,N3.-P.33-37.
8. *Glushkov A.V., Malinovskaya S.V.,* Co-operative laser nuclear processes: border lines effects// In: *New projects and new lines of research in nuclear physics.* Eds. G.Fazio and F.Hanappe, Singapore : World Scientific.-2003.-P.242-280.
9. *Glushkov A.V.,* Energy Approach to Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions// *Low Energy Antiproton Phys., AIP Serie.*-2005.-Vol.796.-P.206-210.
10. *Glushkov A.V., Gurnitskaya E.P., Loboda A.V.,* Advanced quantum mechanical calculation of superheavy ions: energy levels, Radiation and Finite Nuclear size effects// *Low Energy Antiproton Phys., AIP Serie.*-2005.-Vol.796.-P.217-220.
11. *Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Khetselius O.Yu, Loboda A.V., Chernyakova Yu. G., Svinarenko A.V.* QED calculation of the superheavy elements ions: energy levels, radiative corrections and hyperfine structure for different nuclear models// *Nucl. Phys. A.*-2004.-Vol. 734.-p.21-24.
12. *Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Khetselius O.Yu., Loboda A.V., Gurnitskaya E.P.,* QED calculation of heavy multicharged ions with account for the correlation, radiative and nuclear effects//*Progress of Theor. Phys. & Chem.*-2006.-Vol.175.-P.131-148.
13. *Khetselius O.Yu.* , Hyper fine structure of radium// *Photoelectr.*-2005.- N14.-P.83-85.
14. *Glushkov A.V., Gurnitskaya E.P., Khetselius O.Yu.,* Energy levels, Lamb shift, hyperfine structure of heavy Li-like ions within QED calculation approach//*Вісник Київського ун-ту. Сер фіз.-мат.*-2004.-№4 .-С.421-426.
15. *Karpeshin F, Trzhaskovskaya M., Gangrskii Y.P.,* Resonance Internal Conversion in heavy Ions //*ЖЕТР.*-2004.-Vol.99.-P.286-289.

Метод КЕД теорії збурень з урахуванням ядерних ефектів і понадтонка структура спектрів надважких систем. Хецеліус О.Ю.

Розвинуто новий підхід до оцінки понадтонкої структури важких та надважких скінчених фермі-систем, який базується на формалізмі КЕД теорії збурень з використанням наближення калібровочно-інваріантних базисів діраковських біспінорів.

Ключові слова: КЕД теорія збурень, понадтонка структура важких систем.

Method of QED perturbation theory with account of nuclear effects and hyperfine structure of spectra of the superheavy systems. O. Khetselius

It is proposed a new approach to calculating the hyperfine structure parameters for heavy and superheavy finite fermi-systems, which is based on the formalism of QED perturbation theory with using gauge-invariant basises of the Dirac bi-spinors.

Keywords: QED perturbation theory, hyperfine structure of superheavy systems.