

**О.Ю.Хецелиус, к.ф.-м.н.**

*Одесский государственный экологический университет*

## **НОВЫЙ МЕТОД КЭД ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ С УЧЕТОМ ЯДЕРНЫХ ЭФФЕКТОВ И СВЕРХТОНКАЯ СТРУКТУРА СПЕКТРОВ ТЯЖЕЛЫХ СИСТЕМ**

*Изложен новый подход к описанию сверхтонкой структуры СТС тяжелых конечных ферми-систем, базирующийся на методе калибровочно-инвариантной КЭД теории возмущений (ТВ) с корректным учетом ядерных эффектов. Приведены данные расчета констант СТС и электрического квадрупольного момента для изотопа  $^{201}\text{Hg}$ .*

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

**Введение.** Фундаментальной проблемой современной теории тяжелых ферми-систем и квантовой теории поля остается разработка нового неэмпирического высокоточного метода расчета спектров собственных энергий, параметров различных каналов распада, СТС и т.д. с обязательным прецизионным одновременным учетом релятивистских, корреляционных, радиационных и ядерных эффектов [1-17]. Важнейшим фактором является интерференция меж электронными корреляционными и ядерными эффектами и, конечно же развитие адекватной вычислительной процедуры расчета КЭД поправок по возможности избегающей известных разложений по параметрам  $1/Z, \alpha Z, ZR/\alpha$  [1,6,12,13,14]. Крайне осторой является проблема описания и получения надежных данных о спектрах и спектральных характеристиках тяжелых и сверхтяжелых ферми-систем, атомных, ядерных систем, являющихся существенно релятивистскими системами [1-8]. В данной работе развивается новый, усовершенствованный подход [10-13] к оценке СТС тяжелых конечных ферми-систем, базирующийся на формализме калибровочно-инвариантной КЭД ТВ с корректным учетом ядерных поправок в рамках новых методов [9,14] и корреляционных и КЭД (собственно-энергетический вклад и вклад за счет поляризации вакуума в сдвиг Лэмба) поправок в рамках эффективных вычислительных процедур [6,11]. Релятивистские одноэлектронные эффекты учтены в рамках приближения Дирака-Фока (ДФ), причем в отличие от классического метода ДФ, используемый в расчетах базис орбиталей генерируется с учетом условия калибровочной инвариантности. Для генерации использован фундаментальный принцип минимизации функционала, представляющего собой вклад поляризационных диаграмм 4-го порядка КЭД ТВ [7], т.е. вклад диаграмм, связанный с обменом продольными фотонами в мнимую часть энергии. Оператор возмущения ТВ учитывает эффект запаздывания взаимодействия. Магнитное межэлектронное взаимодействие учтено в низшем порядке по параметру  $\alpha^2$  ( $\alpha$ -постоянная тонкой структуры). Ядерные эффекты, в частности, поправка на конечность ядра, и вклад эффектов типа остов-поляризационных эффектов, индуцируемых валентными протонами ядра, учтены в 0-ом приближении ТВ. 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 КЭД сдвигов [1-6]. Для оценки поправок на сдвиг Лэмба применена известная процедура Иванова-Ивановой-Глушкова [6,7], основанная на использовании «точного» расчета Мора для H-подобных ионов [1] и формализме ковариантной регуляризации S-матрицы Фейнмана. В качестве иллюстрации приведены данные расчета констант СТС и электрического квадрупольного момента для  $^{201}\text{Hg}$ .

**Метод расчета: КЭД ТВ.** Остановимся на ключевых моментах метода. Как обычно [9-11], исходим из того, что многоэлектронная система описывается уравнением Дирака с релятивистским гамильтонианом (атомные ед.)

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

где  $h(r)$  – гамильтониан Дирака для электрона в поле ядра конечного размера, 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 КЭД матрицей рассеяния рассмотрен в [6-9]. Формализм Гелл-Мана и Лоу приводят к рядам ТВ по константе связи для сдвигов  $\Delta E$ , которые стандартно диаграмматизируются. Новые приближения в теории удобно формулировать как методы суммирования диаграмм определенного типа. Принципиальная новизна нашего подхода по сравнению с классическими методами [1-6] заключается в использовании *ав initio* принципа выбора 0-го калибровочно-инвариантного приближения ТВ [7] и эффективных процедур учета ядерных, корреляционных, КЭД (поляризация вакуума электрон-позитронного поля) эффектов [9-14]. Пусть электрон движется в сферически симметричном электрическом поле. Состояние электрона определяется значениями главного квантового числа, полным моментом и четностью. Волновая функция (биспинор) имеет вид

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

где  $\Omega_{jlm}(r)$  - шаровой спинор;

$F(r), G(r)$  – радиальные функции Дирака, удовлетворяющие системе уравнений Дирака. Вид радиальных функций Дирака, естественно, зависит от вида  $V(r)$ . При больших  $\chi$  радиальные функции  $F$  и  $G$  быстро изменяются в начале координат

$$F(r), G(r) \approx r^{\gamma-1}, \quad \gamma = \sqrt{\chi^2 - \alpha^2 z^2}. \quad (4)$$

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 заменой:  $f = Fr^{1-|\chi|}$ ,  $g = Gr^{1-|\chi|}$ . Дираковские уравнения для компонент  $F$  и  $G$  преобразуются следующим образом:

$$f' = -(\chi + |\chi|)f/r - \alpha ZVg - (\alpha ZE_{n\chi} + 2/\alpha Z)g, \quad (5)$$

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

где  $E_{n\chi}$  - одноэлектронная энергия (без учета энергии покоя).

Для учета эффекта конечности ядра распределение заряда моделируется гауссовой функцией с эффективным радиусом ядра  $R$  [11]:

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

$$\int_0^\infty dr r^2 \rho(r|R) = 1, \quad \int_0^\infty dr r^3 \rho(r|R) = R, \quad \gamma = 4\pi/R^2, \quad (8)$$

Переход к потенциалу конечного ядра реализуется, например, для кулоновского потенциала со сферически симметричной плотностью  $\rho(r|R)$  с помощью формулы

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

Искомый потенциал вычисляется из следующей системы уравнений:

$$\begin{aligned} V'_{nucl}(r, R) &= (1/r^2) \int_0^r dr' r'^2 \rho(r', R) \equiv (1/r^2) y(r, R), \\ y'(r, R) &= r^2 \rho(r, R), \\ \rho'(r, R) &= -8\gamma^{5/2} r/\sqrt{\pi} \exp(-\gamma r^2) = -2\gamma \rho(r, R) = -\frac{8r}{\pi r^2} \rho(r, R), \end{aligned} \quad (11)$$

с граничными условиями:

$$\begin{aligned} V_{nucl}(0, R) &= -4/(\pi r), \quad y(0, R) = 0, \\ \rho(0, R) &= 4\gamma^{3/2}/\sqrt{\pi} = 32/R^3. \end{aligned} \quad (12)$$

Вычисление потенциалов, их производных, матричных элементов сведено к решению одной системы дифференциальных уравнений (1D процедура). Энергии квадрупольного ( $W_q$ ) и магнитного дипольного ( $W_\mu$ ) взаимодействий определяются стандартно [1,11]:

$$\begin{aligned} W_q &= [\Delta + C(C+1)]B, \quad W_\mu = 0,5 AC, \\ \Delta &= -(4/3)(4\chi-1)(I+1)/[i(I-1)(2I-1)], \\ C &= F(F+1) - J(J+1) - I(I+1), \end{aligned} \quad (14)$$

где  $I$  – спин ядра;

$J, F$  – полный электронный момент и полный момент системы.

Константы СТС расщепления определяются следующими радиальными интегралами:

$$\begin{aligned} A &= \{[(4,32587)10^{-4} Z^2 \chi g_I]/(4\chi^2-1)\} (RA)_{-2}, \\ B &= \{7.2878 \cdot 10^{-7} Z^3 Q/[4\chi^2-1)I(I-1)]\} (RA)_{-3}, \end{aligned} \quad (15)$$

где  $g_I$  – фактор Ланде,

$Q$  – квадрупольный момент ядра (Barn) и

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

$$(RA)_{-3} = \int_0^{\infty} dr r^2 [F^2(r) + G^2(r)U(1/r^2, R)]. \quad (16)$$

**Результаты расчета и выводы.** Далее мы приведем данные расчета констант СТС и электрического квадрупольного момента  $Q$  для изотопа  $^{201}\text{Hg}$ . Ртуть имеет один стабильный изотоп  $^{201}\text{Hg}$  ( $I=3/2$ ) с относительной распространенностью 13,2%. Величины квадрупольных моментов для нескольких радиоактивных изотопов с массами от 185 до 203 представлены группой Ulm и др. (см. [2,10,12]). Разумная компиляция значений  $Q$  для изотопов в интервале масс 185-206 дана в таблицах Raghavan [2]. Имеющиеся в настоящее время экспериментальные значения  $Q$  ( $^{201}\text{Hg}$ ) приведены в табл.1. Мюонное "3d" значение 386(49) мБ использовано в итоговом отчете "year-2001" по ядерным квадрупольным моментам. В табл.2 представлены экспериментальные и рассчитанные значения  $Q$ (мб) для  $^{201}\text{Hg}$  и констант СТС (МГц) для состояния  $^3P_1$  атома  $^{201}\text{Hg}$ . Расчеты выполнены на основе некоррелированного метода ДФ, в многоконфигурационном приближении метода ДФ (МКДФ) с учетом КЭД поправок [2], а также на основе нашего метода [10,13]. Значение момента  $Q$ , полученное нами, лучше всего согласуется с данными полученными группой Ulm и др. Сравнение результатов расчета в рамках нашего метода и метода ДФ показывает, что наши значения константы  $A$  находятся в лучшем согласии с экспериментом, чем ДФ.

Таблица 1 - Значения электрического квадрупольного момента  $Q$  (мб) для  $^{201}\text{Hg}$

$Q$ (мб)	Метод	Ссылка	Год
382,3	Atomic	Наша работа	2007
387 (6)	Atomic	Pyykko et al	2005
347 (43,0)	Nuclear	Fornal et al	2001
385 (40)	Atomic <sup>a</sup>	Ulm et al	1988
485 (68)	Muonic <sup>b</sup>	Gunther et al	1983
386 (49)	Muonic 3d <sup>c</sup>	Hahn et al	1979
267 (37)	Muonic 2p <sup>c</sup>	Hahn et al	1979
390 (20)	Solid <sup>d</sup>	Edelstein and Pound	1975
455 (40)	Atomic $^3P_2$	McDermott and Lichten	1960
420	Atomic	Murakawa	1959
500 (50)	Atomic <sup>e</sup>	Blaise and Chantrel	1957
600	Solid <sup>e</sup>	Dehmelt et al	1954
500	Atomic <sup>e</sup>	Schuler and Schmidt	1935

Примечание: <sup>a</sup> стандартное значение Raghavan; <sup>b</sup> значение  $^{199}\text{Hg}$  ( $I=5/2$ ) согласовано с отношением 201/199; <sup>c</sup> прямой мюонный эксперимент для  $^{201}\text{Hg}$ ; <sup>d</sup> твердотельное значение  $\text{HgCl}_2$  плюс компилированная величина  $^{199}\text{Hg}$  [2,10].

Этот факт мы связываем, во-первых, с использованием калибровочно-инвариантных базисов дираковских би-спиноров, во-вторых, с корректным учетом корреляционных, КЭД и ядерных эффектов. Впервые нами учтен вклад ядерных эффектов типа остов-поляризационных, индуцируемых валентными протонами ядра, в рамках модели [9,14]. Вклад поляризационных и экранировочных поправок, как эффектов 2-го и выше

порядков ТВ, является обязателен (см. табл.2). Корреляционный вклад в константы СТС составляет до 1200 МГц, ядерной и КЭД поправок~ до 2 десятков МГц.

Таблица 2 - Экспериментальные и расчетные значения момента  $Q$  (мб) для  $^{201}\text{Hg}$  и констант СТС (МГц) для состояния  $^3P_1$   $^{201}\text{Hg}$  [2,10,13]

Метод расчета	$Q$ (mb)	$A$ (MHz)	$B$ (MHz)
ДФ	478,13	-4368,266	---
МКДФ (+Брейт+КЭД)	386,626	-5470,810	---
Наст.р-та: Эл.Корр.	-90,913	-1160	-60,963
Наст.р-та: Брейт+КЭД	-2,485	-20,748	-1,101
Наст.р-та: Полная знач.	382,304	-5458, 620	-284,832
Эксперимент	См.табл.1	-5454,569 (0,003)	-280,107 (0,005)

Имеющееся отличие теории и эксперимента мы связываем с отсутствием корректных данных о пространственном распределении магнитного момента внутри ядра (эффект Bohr-Weisskopf), а также неучетом КЭД поправок высших порядков. Поправка за счет пространственного распределения магнитного момента внутри ядра зависит от радиальной формы распределения, которая для  $^{201}\text{Hg}$  в настоящее время неизвестна. Поэтому уместным является применение здесь модифицированного метода Zemach с приближенной оценкой мультипликативной поправки возникающей вследствие распределения магнитного момента для состояний 's' симметрии (см.[10]). Его использование требует выделения в расчетных значениях магнитной константы СТС контактного, спин-дипольного и орбитального членов. Контактный член включает примерно 80% общего значения констант СТС и учтен в расчете. Поправками к эффекту Bohr-Weisskopf вследствие других симметрий мы пренебрегли.

В заключение автор выражает глубокую благодарность проф. Глушкову А.В. за ценные советы.

### 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. *Bieron J., Pyykkö P., Jonsson P.*, Nuclear quadrupole moment of  $^{201}\text{Hg}$ // *Phys.Rev. A.*-2005.-Vol.71.-P.012502-1-8.
3. *Koshelev K.V., Labzowsky L.N., Tupitsyn I.I.*, TInterelectron interaction corrections to hfs structure of the  $2p_{3/2}$  state in Li-like, B-like and N-like Bi ions//*J.Phys.B.*-2004.-Vol.37.-P.843-851.
4. *Ivanova E.P., Ivanov L.N.* Modern Trends in Spectroscopy// *Phys.Rep.*-1991.-Vol.166.-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.*, High order corrections in relativistic perturbation theory: 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., Ambrosov S.V., Loboda A.V.*, Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions // In: New projects and New lines of research in nuclear physics. Eds. G.Fazio, F.Hanappe, Singapore : World Scientific.-2003.-P.126-182.
9. *Glushkov A.V.*, Energy Approach to Resonance states of super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions// Low Energy Antiproton Phys., AIP Ser.(N.-Y.)-2005.-Vol.796.-P.206-210.
10. *Khetselius O.Yu.*, Nuclear quadrupole moments, hfs constants for superheavy ions. Radiation probabilities for ions of Fe in Supernova// Trans. NPDC –NPA III, Europ.Rad.Centre, Belgium, 2007.-p.81.; J.Phys.G., to be publ.;
11. *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// Recent Adv. in Theor. Phys. and Chem. Systems (Springer).-2006.-Vol.15.-P.285-300.
12. *Khetselius O.*, Hyperfine structure of isotopes  $^{73}\text{Ge}$ ,  $^{75}\text{As}$ ,  $^{201}\text{Hg}$ //Photoel.-2007.- Vol.16.-P.131-137.
13. *Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Khetselius O.Yu., Gurnitskaya E.P., Dubrovskaya Yu.V.*, Consistent quantum theory of the recoil induced excitation and ionization in atoms during capture of neutron//J.Phys.C.-2006.- Vol.35.-P.425-430.
14. *Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Khetselius O.Yu., Dubrovskaya Yu.V., Vitavetskaya L.A.*, Quantum calculation of cooperative muon-nuclear processes: discharge of metastable nuclei for  $\mu^-$  capture// Recent Adv. in Theor. Phys.Chem. Systems (Springer).-2006.-Vol.15.-P.301-328.

**Новий метод КЕД теорії збурень з урахуванням ядерних ефектів і понадтонка структура спектрів важких систем. О.Ю.Хецеліус**

*Викладено новий підхід до опису понадтонкої структури важких скінчених фермі-систем, що базується на методі калібровочно-інваріантної КЕД теорії збурень з коректним урахуванням ядерних ефектів. Приведені данні розрахунку сталих СТС і електричного квадрупольного моменту для ізотопу  $^{201}\text{Hg}$ .*

**Ключові слова:** КЕД теорія збурень, понадтонка структура

**New method of QED perturbation theory with account of nuclear effects and hyperfine structure of spectra of heavy systems O.Yu. Khetselius**

*It is proposed new approach to calculating hyperfine structure parameters for heavy finite fermi-systems, which is based on the formalism of gauge-invariant QED perturbation theory with correct accounting for nuclear effects. Results of calculating HFS constants and electric quadrupole moment for isotope of  $^{201}\text{Hg}$  are presented.*

**Keywords:** QED perturbation theory, hyperfine structure